

Supplementary Materials: Is It Reliable to Use Common Molecular Docking Methods for Comparing the Binding Affinities of Enantiomer Pairs for Their Protein Target?

David Ramírez and Julio Caballero

Table S1. Ligand dataset collection of enantiomers.

Target	Compound ID	Activity		Reference	
		R/(+)	S/(-)		
hAChE	VX	1.180×10^{-2} a	1.370 a	[52]	
	nc-VX	2.000×10^{-6} a	1.100×10^{-4} a	[52]	
	Bambuterol	4.300×10^2 a	1.600×10^{-1} a	[37]	
	a(EMP-CHMC)	1.200×10^6 a	2.800×10^7 a	[33]	
	b(nPrMP-CHMC)	6.100×10^6 a	1.580×10^8 a	[33]	
	1	2.000×10^2 b	1.000×10^4 b	[48]	
	2	2.600×10^1 b	8.000×10^1 b	[48]	
	3	1.422×10^2 b	1.020×10^2 b	[48]	
	HupA	3.153×10^3 c	6.500×10^1 c	[58]	
	18a	1.400×10^1 c	6.090×10^2 c	[55]	
	Malaoxon	1.270×10^5 a	1.090×10^4 a	[53]	
	Dizocilpine	2.000×10^{-1} b	6.200×10^{-3} b	[42]	
	Cycloheptyl-CH ₃	7.600×10^2 a	2.200×10^5 a	[35]	
	Cycloheptyl-C ₂ H ₅	1.400×10^1 a	6.500×10^4 a	[35]	
	Cycloheptyl-C ₄ H ₉	3.200×10^1 a	9.400×10^4 a	[35]	
	Cycloheptyl-C ₅ H ₁₁	1.290×10^2 a	3.400×10^5 a	[35]	
	Cycloheptyl-C ₆ H ₁₃	1.140×10^2 a	2.900×10^5 a	[35]	
	Isopropyl-CH ₃	1.500×10^1 a	3.170×10^2 a	[35]	
	Isopropyl-C ₂ H ₅	2.900×10^1 a	7.500×10^1 a	[35]	
	Isopropyl-C ₅ H ₁₁	2.600×10^3 a	1.500×10^3 a	[35]	
	Isopropyl-C ₆ H ₁₃	3.000×10^1 a	3.600×10^3 a	[35]	
	Cycloheptyl	1.400×10^6 a	3.000×10^8 a	[35]	
	Isopropyl	8.700×10^4 a	1.300×10^7 a	[35]	
	3,3-Dimethylbutyl	3.300×10^7 a	1.000×10^9 a	[35]	
	Limonene	2.200×10^{-1} d	2.500×10^{-1} d	[51]	
	Terpinen-4-ol	2.440×10^{-1} d	2.140×10^{-1} d	[51]	
	Carvone	1.850×10^6 c	1.380×10^6 c	[51]	
	Profenofos	1.000×10^3 c	7.180×10^4 c	[43]	
	Crotoxyphos	1.900×10^3 c	1.000×10^3 c	[43]	
	mAChE	Bambuterol	7.900×10^2 a	7.700×10^{-1} a	[37]
		P-CHMPTCh	8.100×10^{-1} a	1.900×10^2 a	[47]
		iPrMPTCh	1.400×10^{-1} a	1.600×10^1 a	[47]
DMBMPTCh		1.900×10^1 a	3.600×10^2 a	[47]	
hBChE	Bambuterol	6.400×10^6 a	1.200×10^6 a	[37]	
	HupA	2.829×10^5 c	5.363×10^4 c	[58]	
	Malaoxon	1.460×10^4 a	4.240×10^3 a	[53]	
	Dizocilpine	4.500×10^{-1} b	1.790×10^{-2} b	[42]	

Table S1. Cont.

Target	Compound ID	Activity		Reference
		R/(+)	S/(-)	
hMAO-A	PwTx-I	3.900×10^4 c	3.400×10^4 c	[54]
	11a–11b	3.900×10^1 c	2.400×10^1 c	[56]
	11c–11d	1.370×10^3 c	1.540×10^3 c	[56]
	11g–11h	3.700×10^1 c	2.500×10^1 c	[56]
	11i–11j	6.500×10^2 c	7.000×10^1 c	[56]
	3a–3b	1.330×10^2 b	5.840×10^2 b	[36]
	4a–4b	1.690×10^2 b	6.140×10^2 b	[36]
	5a–5b	1.130×10^1 b	1.816×10^2 b	[36]
	FLA 336	9.000×10^{-1} b	4.000×10^{-1} b	[39]
	7–8	4.800 c	6.800 c	[40]
	3	3.100×10^1 b	2.840×10^2 b	[34]
	7	7.700×10^1 b	1.600×10^2 b	[34]
	9	6.000 b	1.860×10^2 b	[34]
	11	2.000 b	1.020×10^2 b	[34]
	1	1.300×10^{-2} b	5.000×10^{-2} b	[38]
	4	1.200×10^{-2} b	5.000×10^{-3} b	[38]
	SAL	3.610×10^1 b	8.130×10^1 b	[50]
	NM-SAL	3.790×10^1 b	1.495×10^2 b	[50]
	5–6	7.300×10^{-1} b	2.600 b	[57]
	7–8	1.800 b	1.100 b	[57]
11–12	1.300 b	6.900×10^{-1} b	[57]	
13–14	1.800×10^{-1} b	7.200×10^{-1} b	[57]	
mMAO-A	Amphetamine	2.030×10^2 b	3.380×10^1 b	[39]
	Methamphetamine	9.900×10^1 b	1.100×10^2 b	[39]
	Deprenyl	7.600×10^1 b	1.400×10^1 b	[39]
hMAO-B	PwTx-I	1.500×10^4 c	8.000×10^3 c	[54]
	11a–11b	1.229×10^4 c	1.681×10^4 c	[56]
	11c–11d	2.900×10^4 c	8.470×10^4 c	[56]
	11g–11h	1.917×10^4 c	2.120×10^4 c	[56]
	11i–11j	3.400×10^4 c	8.007×10^4 c	[56]
	3a–3b	1.410×10^1 b	1.560×10^2 b	[36]
	4a–4b	4.780×10^1 b	1.490×10^2 b	[36]
	5a–5b	2.490×10^1 b	4.490×10^1 b	[36]
	FLA 336	2.500×10^1 b	2.100×10^{-2} b	[39]
	7–8	1.000×10^1 b	2.700 b	[40]
	1	2.700×10^{-3} b	1.000×10^{-3} b	[38]
	4	1.400 b	2.400 b	[38]

Table S1. Cont.

Target	Compound ID	Activity		Reference
		R/(+)	S/(-)	
	SS(R)SS–SS(S)SS	1.100 ^c	1.500 ^c	[49]
	S(R)SSS–S(S)SSS	1.200 ^c	1.500 ^c	[49]
	SRRS(R)–SRRS(S)	3.980 × 10 ¹ ^c	3.300 ^c	[49]
	SSSS(R)–SSSS(S)	1.220 × 10 ¹ ^c	1.500 ^c	[49]
	S(R)RSR–S(S)RSR	3.980 × 10 ¹ ^c	2.940 × 10 ¹ ^c	[49]
	SRS(R)R–SRS(S)R	1.000 × 10 ⁵ ^c	5.400 × 10 ¹ ^c	[49]
	RR(R)SS–RR(S)SS	1.000 × 10 ⁵ ^c	1.080 × 10 ² ^c	[49]
	SSS(R)S–SSS(S)S	1.100 × 10 ³ ^c	1.500 ^c	[49]
	(R)SSSS–(S)SSSS	1.900 × 10 ³ ^c	1.500 ^c	[49]
	SS(R)RR–SS(S)RR	2.600 × 10 ³ ^c	1.000 × 10 ⁵ ^c	[49]
	RRS(R)R–RRS(S)R	1.000 × 10 ⁵ ^c	5.500 × 10 ³ ^c	[49]
	S(R)RRS–S(S)RRS	3.980 × 10 ¹ ^c	7.100 × 10 ³ ^c	[49]
	RR(R)RS–RR(S)RS	1.000 × 10 ⁵ ^c	7.800 × 10 ³ ^c	[49]
	R(R)RRR–R(S)RRR	1.000 × 10 ⁵ ^c	2.300 × 10 ⁴ ^c	[49]
	(R)RRRR–(S)RRRR	1.000 × 10 ⁵ ^c	3.300 × 10 ⁴ ^c	[49]
	(R)SSSR–(S)SSSR	3.600 × 10 ⁴ ^c	1.220 × 10 ¹ ^c	[49]
	RSR(R)R–RSR(S)R	2.300 × 10 ⁴ ^c	4.700 × 10 ⁴ ^c	[49]
hACE	RSR(R)S–RSR(S)S	1.000 × 10 ⁵ ^c	6.000 × 10 ⁴ ^c	[49]
	4a(2R,3R)–4b(2S,3S)	8.000 × 10 ⁻² ^b	1.600 × 10 ⁻² ^b	[41]
	4c(2S,3R)–4d(2R,3S)	4.200 × 10 ⁻³ ^b	9.500 × 10 ⁻² ^b	[41]
	8b(2R,3R)–8a(2S,3S)	2.400 × 10 ⁻² ^b	7.000 × 10 ⁻² ^b	[45]
	8c(2S,3R)–8d(2R,3S)	4.600 × 10 ⁻³ ^b	3.000 × 10 ⁻² ^b	[45]
	15b(2R,3R)–15a(2S,3S)	5.500 × 10 ⁻² ^b	5.800 × 10 ⁻² ^b	[45]
	15c(2S,3R)–15d(2R,3S)	4.100 × 10 ⁻³ ^b	6.600 × 10 ⁻² ^b	[45]
	9b(2R3R)–9a(2S3S)	3.300 × 10 ⁻² ^b	2.900 × 10 ⁻² ^b	[44]
	9c(2S3R)–9d(2R3S)	1.500 × 10 ⁻² ^b	2.900 × 10 ⁻¹ ^b	[44]
	10a(2S3S)–10b(2R3R)	6.500 × 10 ⁻² ^b	1.300 × 10 ⁻¹ ^b	[44]
	10c(2S3R)–10d(2R3S)	3.800 × 10 ⁻² ^b	3.300 × 10 ⁻¹ ^b	[44]
	13b(2R3R)–13a(2S3S)	4.300 × 10 ⁻² ^b	4.100 × 10 ⁻² ^b	[44]
	13c(2S3R)–13d(2R3S)	1.000 × 10 ⁻² ^b	1.700 × 10 ⁻¹ ^b	[44]
	14b(2R3R)–14a(2S3S)	7.600 × 10 ⁻² ^b	2.600 × 10 ⁻² ^b	[44]
	14c(2S3R)–14d(2R3S)	1.000 × 10 ⁻² ^b	1.340 × 10 ⁻¹ ^b	[44]
	5f1–5f2	1.400 × 10 ⁻³ ^b	3.600 × 10 ⁻² ^b	[46]
	7f1–7f2	4.000 × 10 ⁻⁴ ^b	3.800 × 10 ⁻³ ^b	[46]
	8f1–8f2	4.100 × 10 ⁻⁴ ^b	6.500 × 10 ⁻⁴ ^b	[46]

Table S1. Cont.

Target	Compound ID	Activity		Reference
		R/(+)	S/(-)	
hNEP	4a(2R,3R)–4b(2S,3S)	2.300×10^{-3} ^b	2.100×10^{-3} ^b	[41]
	4c(2S,3R)–4d(2R,3S)	1.700×10^{-3} ^b	7.000×10^{-4} ^b	[41]
	8b(2R,3R)–8a(2S,3S)	1.300×10^{-3} ^b	3.000×10^{-2} ^b	[45]
	8c(2S,3R)–8d(2R,3S)	2.700×10^{-3} ^b	1.500×10^{-2} ^b	[45]
	15b(2R,3R)–15a(2S,3S)	1.800×10^{-3} ^b	9.400×10^{-3} ^b	[45]
	15c(2S,3R)–15d(2R,3S)	3.800×10^{-3} ^b	1.300×10^{-2} ^b	[45]
	9b(2R3R)–9a(2S3S)	2.400×10^{-3} ^b	2.200×10^{-3} ^b	[44]
	9c(2S3R)–9d(2R3S)	2.500×10^{-3} ^b	5.000×10^{-3} ^b	[44]
	10a(2S3S)–10b(2R3R)	3.000×10^{-2} ^b	1.500×10^{-3} ^b	[44]
	10c(2S3R)–10d(2R3S)	3.500×10^{-4} ^b	5.000×10^{-3} ^b	[44]
	13b(2R3R)–13a(2S3S)	7.000×10^{-4} ^b	1.000×10^{-2} ^b	[44]
	13c(2S3R)–13d(2R3S)	2.100×10^{-3} ^b	2.700×10^{-2} ^b	[44]
	14b(2R3R)–14a(2S3S)	3.000×10^{-3} ^b	8.000×10^{-3} ^b	[44]
	14c(2S3R)–14d(2R3S)	3.000×10^{-3} ^b	4.300×10^{-2} ^b	[44]
	5f1–5f2	1.300×10^{-1} ^b	1.850 ^b	[46]
	7f1–7f2	6.800×10^{-2} ^b	1.000×10^2 ^b	[46]
	8f1–8f2	1.720×10^{-1} ^b	6.700 ^b	[46]
	hECE	8b(2R,3R)–8a(2S,3S)	1.000×10^{-2} ^b	1.460 ^b
8c(2S,3R)–8d(2R,3S)		1.000×10^{-1} ^b	1.800×10^{-1} ^b	[45]
15b(2R,3R)–15a(2S,3S)		1.800×10^{-2} ^b	1.100×10^{-1} ^b	[45]
15c(2S,3R)–15d(2R,3S)		2.800×10^{-2} ^b	9.000×10^{-2} ^b	[45]
9b(2R3R)–9a(2S3S)		2.000×10^{-1} ^b	1.000×10^{-1} ^b	[44]
9c(2S3R)–9d(2R3S)		7.800×10^{-1} ^b	5.800×10^{-1} ^b	[44]
10a(2S3S)–10b(2R3R)		1.100×10^{-1} ^b	1.350×10^{-1} ^b	[44]
10c(2S3R)–10d(2R3S)		9.200×10^{-1} ^b	1.900×10^{-1} ^b	[44]
13b(2R3R)–13a(2S3S)		2.600×10^{-2} ^b	1.140 ^b	[44]
13c(2S3R)–13d(2R3S)		2.900×10^{-1} ^b	6.800 ^b	[44]
14b(2R3R)–14a(2S3S)		2.500×10^{-1} ^b	6.700 ^b	[44]
14c(2S3R)–14d(2R3S)		1.900×10^{-1} ^b	1.240 ^b	[44]
5f1–5f2		2.600×10^{-2} ^b	8.000×10^{-3} ^b	[46]
7f1–7f2		2.400×10^{-1} ^b	7.700×10^{-3} ^b	[46]
8f1–8f2		2.750×10^{-1} ^b	1.400×10^{-2} ^b	[46]

^a k_i ($M^{-1} \cdot \text{min}^{-1}$); ^b K_i (μM); ^c IC_{50} (nM); ^d % inhibitory activity (1.2 mM).

Table S2. Ligand dataset collection of ligands with different molecular weights.

Target	Compound	Activity		Reference
		Lower M_w	Higher M_w	
hAChE	(S)-EMP-CHMC-(S)-nPrMP-CHMC	2.800×10^7 a	1.580×10^8 a	[33]
	(R)-EMP-CHMC-(R)-nPrMP-CHMC	1.200×10^6 a	6.100×10^6 a	[33]
	(S)-Cycloheptyl-CH ₃ -(S)-Cycloheptyl-C ₂ H ₅	2.200×10^5 a	6.500×10^4 a	[35]
	(S)-Cycloheptyl-CH ₃ -(S)-Cycloheptyl-C ₄ H ₉	2.200×10^5 a	9.400×10^4 a	[35]
	(S)-Cycloheptyl-CH ₃ -(S)-Cycloheptyl-C ₅ H ₁₁	2.200×10^5 a	3.400×10^5 a	[35]
	(S)-Cycloheptyl-CH ₃ -(S)-Cycloheptyl-C ₆ H ₁₃	2.200×10^5 a	2.900×10^5 a	[35]
	(R)-Cycloheptyl-CH ₃ -(R)-Cycloheptyl-C ₂ H ₅	7.600×10^2 a	1.400×10^1 a	[35]
	(R)-Cycloheptyl-CH ₃ -(R)-Cycloheptyl-C ₄ H ₉	7.600×10^2 a	3.200×10^1 a	[35]
	(R)-Cycloheptyl-CH ₃ -(R)-Cycloheptyl-C ₅ H ₁₁	7.600×10^2 a	1.290×10^2 a	[35]
	(R)-Cycloheptyl-CH ₃ -(R)-Cycloheptyl-C ₆ H ₁₃	7.600×10^2 a	1.140×10^2 a	[35]
	2a-2i	5.020×10^1 c	6.400×10^2 c	[63]
	2b-2g	3.730×10^1 c	2.090×10^2 c	[63]
	2b-2l	3.730×10^1 c	4.150×10^2 c	[63]
	2c-2k	4.210×10^1 c	2.770×10^2 c	[63]
	2c-2m	4.210×10^1 c	4.810×10^2 c	[63]
	3a-3e	3.640×10^2 c	1.730×10^1 c	[63]
	3a-3k	3.640×10^2 c	5.290×10^2 c	[63]
	3b-3f	2.400×10^2 c	4.160 c	[63]
	3b-3l	2.400×10^2 c	6.200×10^1 c	[63]
	3c-3g	2.800×10^2 c	7.800×10^{-1} c	[63]
	3c-3m	2.800×10^2 c	4.060×10^1 c	[63]
	3d-3h	3.160×10^1 c	1.850 c	[63]
	3d-3n	3.160×10^1 c	3.760×10^1 c	[63]
	3a-3e	1.100×10^3 c	2.280×10^3 c	[64]
	3b-3f	8.200×10^2 c	1.360×10^3 c	[64]
	3c-3g	2.100×10^2 c	1.000×10^2 c	[64]
	3d-3h	1.500×10^2 c	2.200×10^2 c	[64]
	3i-3m	2.660×10^3 c	3.180×10^3 c	[64]
	3j-3n	1.960×10^3 c	3.580×10^3 c	[64]
	3k-3o	5.000×10^1 c	1.500×10^2 c	[64]
	3l-3p	1.400×10^3 c	1.300×10^2 c	[64]
	1a-1c	2.140×10^3 c	4.900×10^2 c	[65]
	1a-1f	2.140×10^3 c	4.400×10^2 c	[65]
	1b-1d	4.200×10^2 c	2.700×10^2 c	[65]
	1b-1g	4.200×10^2 c	3.500×10^1 c	[65]
	1c-1f	4.900×10^2 c	4.400×10^2 c	[65]
	1d-1g	2.700×10^2 c	3.500×10^1 c	[65]
	1j-1n	2.400×10^2 c	1.600×10^2 c	[65]
	1k-1o	4.500×10^1 c	1.000×10^2 c	[65]
	1m-1p	2.900×10^2 c	8.200×10^1 c	[65]
	2a-2c	3.740×10^3 c	6.900×10^2 c	[65]
	2a-2f	3.740×10^3 c	1.480×10^3 c	[65]
	2b-2d	1.380×10^3 c	3.800×10^2 c	[65]
	2b-2g	1.380×10^3 c	2.900×10^2 c	[65]
	2c-2f	6.900×10^2 c	1.480×10^3 c	[65]
	2d-2g	3.800×10^2 c	2.900×10^2 c	[65]
	2e-2i	1.540×10^3 c	1.070×10^3 c	[65]
2j-2n	2.580×10^3 c	6.600×10^2 c	[65]	
2k-2o	1.500×10^2 c	1.200×10^2 c	[65]	

Table S2. Cont.

Target	Compound	Activity		Reference
		Lower M_w	Higher M_w	
hBuChE	2a–2i	5.114×10^3 c	2.794×10^3 c	[63]
	2b–2g	3.045×10^4 c	2.337×10^3 c	[63]
	2b–2l	3.045×10^4 c	3.224×10^3 c	[63]
	2c–2k	1.658×10^4 c	3.986×10^3 c	[63]
	2c–2m	1.658×10^4 c	3.256×10^3 c	[63]
	3a–3e	1.663×10^3 c	3.229×10^3 c	[63]
	3a–3k	1.663×10^3 c	8.973×10^3 c	[63]
	3b–3f	1.722×10^3 c	6.039×10^3 c	[63]
	3b–3l	1.722×10^3 c	2.930×10^3 c	[63]
	3c–3g	2.428×10^3 c	1.520×10^3 c	[63]
	3c–3m	2.428×10^3 c	3.756×10^4 c	[63]
	3d–3h	5.880×10^2 c	4.509×10^3 c	[63]
	3d–3n	5.880×10^2 c	2.687×10^4 c	[63]
	3a–3e	2.070×10^5 c	1.900×10^5 c	[64]
	3b–3f	2.880×10^5 c	1.990×10^5 c	[64]
	3c–3g	1.980×10^6 c	2.510×10^5 c	[64]
	3d–3h	1.370×10^6 c	2.340×10^5 c	[64]
	3i–3m	3.950×10^4 c	5.550×10^4 c	[64]
	3j–3n	2.120×10^5 c	1.580×10^5 c	[64]
	3k–3o	8.430×10^4 c	2.620×10^5 c	[64]
	3l–3p	1.300×10^5 c	1.760×10^5 c	[64]
	1a–1c	8.930×10^4 c	3.680×10^4 c	[65]
	1a–1f	8.930×10^4 c	7.100×10^4 c	[65]
	1b–1d	3.150×10^5 c	2.010×10^4 c	[65]
	1b–1g	3.150×10^5 c	8.200×10^4 c	[65]
	1c–1f	3.680×10^4 c	7.100×10^4 c	[65]
	1d–1g	2.010×10^4 c	8.200×10^4 c	[65]
	1j–1n	4.160×10^4 c	5.520×10^4 c	[65]
	1k–1o	2.660×10^4 c	8.460×10^4 c	[65]
	2a–2c	2.520×10^4 c	1.850×10^4 c	[65]
	2a–2f	2.520×10^4 c	3.200×10^4 c	[65]
	2b–2d	4.070×10^4 c	3.450×10^1 c	[65]
	2b–2g	4.070×10^4 c	1.170×10^4 c	[65]
	2c–2f	1.850×10^4 c	3.200×10^4 c	[65]
	2d–2g	3.450×10^4 c	1.170×10^4 c	[65]
	2j–2n	4.220×10^4 c	7.040×10^4 c	[65]
	2k–2o	3.320×10^4 c	4.830×10^4 c	[65]

Table S2. Cont.

Target	Compound	Activity		Reference
		Lower M_w	Higher M_w	
hMAO-A	2-3	1.923×10^4 c	4.310×10^3 c	[61]
	2a-4a	1.200×10^1 c	4.100×10^1 c	[66]
	5a-6a	3.600 c	1.600×10^{-3} c	[66]
	5b-6b	2.700×10^{-1} c	8.900×10^1 c	[66]
	Harmine-3a	1.690×10^1 b	5.000 b	[62]
	Harmine-3b	1.690×10^1 b	3.900 b	[62]
	Harmine-3c	1.690×10^1 b	2.950×10^1 b	[62]
	Harmine-3e	1.690×10^1 b	3.600 b	[62]
	Harmine-3f	1.690×10^1 b	4.300 b	[62]
	Harmine-3g	1.690×10^1 b	1.260×10^1 b	[62]
	Harmine-3h	1.690×10^1 b	5.000 b	[62]
	3a-3b	5.000 b	3.900 b	[62]
	3a-3c	5.000 b	2.950×10^1 b	[62]
	3a-3e	5.000 b	3.600 b	[62]
	3a-3f	5.000 b	4.300 b	[62]
	3a-3g	5.000 b	1.260×10^1 b	[62]
	3a-3h	5.000 b	5.000 b	[62]
	3b-3c	3.900 b	2.950×10^1 b	[62]
	3b-3e	3.900 b	3.600 b	[62]
	3b-3f	3.900 b	4.300 b	[62]
	3b-3g	3.900 b	1.260×10^1 b	[62]
	3b-3h	3.900 b	5.000 b	[62]
	3c-3e	2.950×10^1 b	3.600 b	[62]
	3c-3f	2.950×10^1 b	4.300 b	[62]
	3c-3g	2.950×10^1 b	1.260×10^1 b	[62]
	3c-3h	2.950×10^1 b	5.000 b	[62]
	3e-3f	3.600 b	4.300 b	[62]
	3e-3g	3.600 b	1.260×10^1 b	[62]
	3e-3h	3.600 b	5.000 b	[62]
	3f-3g	4.300 b	1.260×10^1 b	[62]
	3f-3h	4.300 b	5.000 b	[62]
	3g-3h	1.260×10^1 b	5.000 b	[62]
	2-3	8.310 c	3.803×10^1 c	[61]
	2a-4a	6.400 c	1.900×10^2 c	[66]
	5a-6a	4.900 c	3.700 c	[66]
	5b-6b	1.000×10^1 c	4.800 c	[66]
	4a-5a	4.780×10^1 b	2.490×10^1 b	[36]
	4b-5b	1.490×10^2 b	4.490×10^1 b	[36]
	Harmine-3f	1.208×10^5 b	2.216×10^2 b	[62]

Table S2. Cont.

Target	Compound	Activity		Reference
		Lower M_w	Higher M_w	
hACE	5-7	7.700×10^1 b	1.500×10^2 b	[44]
	5-8	7.700×10^1 b	2.500×10^2 b	[44]
	5-9	7.700×10^1 b	4.000×10^1 b	[44]
	5-10	7.700×10^1 b	6.200×10^1 b	[44]
	5-11	7.700×10^1 b	4.700×10^1 b	[44]
	5-13	7.700×10^1 b	2.000×10^1 b	[44]
	5-14	7.700×10^1 b	1.800×10^1 b	[44]
	7-8	1.500×10^2 b	2.500×10^2 b	[44]
	7-9	1.500×10^2 b	4.000×10^1 b	[44]
	7-10	1.500×10^2 b	6.200×10^1 b	[44]
	7-11	1.500×10^2 b	4.700×10^1 b	[44]
	7-13	1.500×10^2 b	2.000×10^1 b	[44]
	7-14	1.500×10^2 b	1.800×10^1 b	[44]
	8-9	2.500×10^2 b	4.000×10^1 b	[44]
	8-10	2.500×10^2 b	6.200×10^1 b	[44]
	8-11	2.500×10^2 b	4.700×10^1 b	[44]
	8-13	2.500×10^2 b	2.000×10^1 b	[44]
	8-14	2.500×10^2 b	1.800×10^1 b	[44]
	9-10	4.000×10^1 b	6.200×10^1 b	[44]
	9-11	4.000×10^1 b	4.700×10^1 b	[44]
	9-13	4.000×10^1 b	2.000×10^1 b	[44]
	9-14	4.000×10^1 b	1.800×10^1 b	[44]
	10-11	6.200×10^1 b	4.700×10^1 b	[44]
	10-13	6.200×10^1 b	2.000×10^1 b	[44]
	10-14	6.200×10^1 b	1.800×10^1 b	[44]
	11-13	4.700×10^1 b	2.000×10^1 b	[44]
	11-14	4.700×10^1 b	1.800×10^1 b	[44]
	13-14	2.000×10^1 b	1.800×10^1 b	[44]

Table S2. Cont.

Target	Compound	Activity		Reference
		Lower M_w	Higher M_w	
hNEP	5-7	1.350×10^2 ^b	2.200×10^1 ^b	[44]
	5-8	1.350×10^2 ^b	1.400×10^2 ^b	[44]
	5-9	1.350×10^2 ^b	3.000 ^b	[44]
	5-10	1.350×10^2 ^b	4.800 ^b	[44]
	5-11	1.350×10^2 ^b	5.400 ^b	[44]
	5-13	1.350×10^2 ^b	1.800 ^b	[44]
	5-14	1.350×10^2 ^b	4.500 ^b	[44]
	7-8	2.200×10^1 ^b	1.400×10^2 ^b	[44]
	7-9	2.200×10^1 ^b	3.000 ^b	[44]
	7-10	2.200×10^1 ^b	4.800 ^b	[44]
	7-11	2.200×10^1 ^b	5.400 ^b	[44]
	7-13	2.200×10^1 ^b	1.800 ^b	[44]
	7-14	2.200×10^1 ^b	4.500 ^b	[44]
	8-9	1.400×10^2 ^b	3.000 ^b	[44]
	8-10	1.400×10^2 ^b	4.800 ^b	[44]
	8-11	1.400×10^2 ^b	5.400 ^b	[44]
	8-13	1.400×10^2 ^b	1.800 ^b	[44]
	8-14	1.400×10^2 ^b	4.500 ^b	[44]
	9-10	3.000 ^b	4.800 ^b	[44]
	9-11	3.000 ^b	5.400 ^b	[44]
	9-13	3.000 ^b	1.800 ^b	[44]
	9-14	3.000 ^b	4.500 ^b	[44]
	10-11	4.800 ^b	5.400 ^b	[44]
	10-13	4.800 ^b	1.800 ^b	[44]
10-14	4.800 ^b	4.500 ^b	[44]	
11-13	5.400 ^b	1.800 ^b	[44]	
11-14	5.400 ^b	4.500 ^b	[44]	
13-14	1.800 ^b	4.500 ^b	[44]	
hECE	5-7	4.150×10^3 ^b	1.560×10^3 ^b	[44]
	5-9	4.150×10^3 ^b	3.000×10^2 ^b	[44]
	5-10	4.150×10^3 ^b	2.200×10^2 ^b	[44]
	5-11	4.150×10^3 ^b	9.800×10^2 ^b	[44]
	5-13	4.150×10^3 ^b	6.000×10^2 ^b	[44]
	5-14	4.150×10^3 ^b	3.000×10^2 ^b	[44]
	7-9	1.560×10^3 ^b	3.000×10^2 ^b	[44]
	7-10	1.560×10^3 ^b	2.200×10^2 ^b	[44]
	7-11	1.560×10^3 ^b	9.800×10^2 ^b	[44]
	7-13	1.560×10^3 ^b	6.000×10^2 ^b	[44]
	7-14	1.560×10^3 ^b	3.000×10^2 ^b	[44]
	9-10	3.000×10^2 ^b	2.200×10^2 ^b	[44]
	9-11	3.000×10^2 ^b	9.800×10^2 ^b	[44]
	9-13	3.000×10^2 ^b	6.000×10^2 ^b	[44]
	9-14	3.000×10^2 ^b	3.000×10^2 ^b	[44]
	10-11	2.200×10^2 ^b	9.800×10^2 ^b	[44]
	10-13	2.200×10^2 ^b	6.000×10^2 ^b	[44]
10-14	2.200×10^2 ^b	3.000×10^2 ^b	[44]	
11-13	9.800×10^2 ^b	6.000×10^2 ^b	[44]	
11-14	9.800×10^2 ^b	3.000×10^2 ^b	[44]	
13-14	6.000×10^2 ^b	3.000×10^2 ^b	[44]	

^a k_i ($M^{-1} \cdot \text{min}^{-1}$); ^b K_i (μM); ^c IC_{50} (nM).