Table S2. The docked natural products which reached the basic requirement of potential interactions with SARS-CoV-2 PLPro (Ranked from left to right in each line)

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| MOL003130 | MOL002037 | MOL000010 | MOL001875 | MOL003051 | MOL003309 |
| MOL003076 | MOL003284 | MOL003077 | MOL003334 | MOL000415 | MOL013161 |
| MOL007792 | MOL009734 | MOL000007 | MOL003316 | MOL003061 | MOL003118 |
| MOL003327 | MOL003333 | MOL003292 | MOL003346 | MOL003332 | MOL002921 |
| MOL002027 | MOL004368 | MOL003093 | MOL002931 | MOL008595 | MOL002702 |
| MOL005368 | MOL003296 | MOL000561 | MOL003287 | MOL003304 | MOL002229 |
| MOL003336 | MOL003075 | MOL003313 | MOL003014 | MOL003116 | MOL000654 |
| MOL003030 | MOL000437 | MOL003349 | MOL001680 | MOL000870 | MOL003037 |
| MOL000536 | MOL003307 | MOL008151 | MOL003092 | MOL003009 | MOL001494 |
| MOL001490 | MOL003306 | MOL001817 | MOL002934 | MOL003305 | MOL000009 |
| MOL003298 | MOL003351 | MOL003054 | MOL003063 | MOL002879 | MOL002935 |
| MOL003015 | MOL003297 | MOL003331 | MOL000416 | MOL012245 | MOL006370 |
| MOL002909 | MOL002067 | MOL003345 | MOL003010 | MOL003301 | MOL003119 |
| MOL003320 | MOL002923 | MOL002707 | MOL000702 | MOL002924 | MOL003326 |
| MOL001495 | MOL003920 | MOL003099 | MOL001641 | MOL003020 | MOL003005 |
| MOL002927 | MOL003108 | MOL003355 | MOL003022 | MOL003322 | MOL003013 |
| MOL002911 | MOL003048 | MOL000655 | MOL002912 | MOL003356 | MOL003128 |
| MOL002819 | MOL000663 | MOL003290 | MOL003308 | MOL005841 | MOL003011 |
| MOL003103 | MOL001938 | MOL001889 | MOL003330 | MOL002083 | MOL003109 |
| MOL000522 | MOL010415 | MOL003283 | MOL003062 | MOL001410 | MOL002914 |
| MOL000971 | MOL002918 | MOL003094 | MOL003121 | MOL000860 | MOL000879 |
| MOL003329 | MOL010206 | MOL003299 | MOL003374 | MOL002737 | MOL001842 |
| MOL009730 | MOL003285 | MOL005402 | MOL000552 | MOL003352 | MOL003018 |
| MOL002919 | MOL002932 | MOL003288 | MOL002917 | MOL012246 | MOL000868 |
| MOL000869 | MOL003025 | MOL003059 | MOL004684 | MOL001955 | MOL003073 |
| MOL000131 | MOL003095 | MOL002915 | MOL003129 | MOL000537 | MOL003105 |
| MOL002916 | MOL012266 | MOL003357 | MOL003354 | MOL003341 | MOL000523 |
| MOL002929 | MOL003370 | MOL011081 | MOL008206 | MOL002933 | MOL002008 |
| MOL002773 | MOL003096 | MOL003350 | MOL011322 | MOL001398 | MOL000069 |
| MOL003295 | MOL005272 | MOL002928 | MOL002566 | MOL003291 | MOL001506 |
| MOL000008 | MOL003053 | MOL000396 | MOL001818 | MOL003044 | MOL000676 |
| MOL003097 | MOL003117 | MOL001386 | MOL003098 | MOL003043 | MOL001392 |
| MOL001393 | MOL002936 | MOL003055 | MOL003023 | MOL000650 | MOL000867 |
| MOL003113 | MOL000098 | MOL000674 | MOL012267 | MOL008615 | MOL000422 |
| MOL003124 | MOL012240 | MOL003016 | MOL003007 | MOL003101 | MOL000791 |
| MOL001640 | MOL000006 | MOL003080 | MOL003324 | MOL001620 | MOL002926 |
| MOL003112 | MOL000073 | MOL003021 | MOL002910 | MOL005577 | MOL000173 |
| MOL000228 | MOL003036 | MOL002937 | MOL003353 | MOL002913 | MOL003102 |
| MOL003006 | MOL000252 | MOL000597 | MOL000864 | MOL003074 | MOL003050 |
| MOL006218 | MOL003104 | MOL001689 | MOL002925 | MOL000305 | MOL000886 |
| MOL002714 | MOL003122 | MOL003035 | MOL002560 | MOL000610 | MOL002908 |
| MOL000885 | MOL003302 | MOL003360 | MOL003364 | MOL000734 | MOL009520 |
| MOL000525 | MOL004682 | MOL000479 |  |  |  |