Table S3. The docked natural products which reached the basic requirement of potential interactions with SARS-CoV-2 Mpro N3-binding site (Ranked from left to right in each line)

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| MOL003008 | MOL003337 | MOL003332 | MOL003110 | MOL003130 | MOL000870 |
| MOL007792 | MOL003331 | MOL003285 | MOL003333 | MOL003316 | MOL003013 |
| MOL003313 | MOL000522 | MOL005224 | MOL000415 | MOL003352 | MOL003030 |
| MOL003076 | MOL003314 | MOL003304 | MOL003075 | MOL002707 | MOL003373 |
| MOL003307 | MOL003051 | MOL002702 | MOL003108 | MOL002037 | MOL001875 |
| MOL013161 | MOL003309 | MOL003296 | MOL003334 | MOL003035 | MOL002921 |
| MOL003009 | MOL003348 | MOL003336 | MOL003351 | MOL000437 | MOL003077 |
| MOL000536 | MOL002923 | MOL003305 | MOL000010 | MOL000702 | MOL002027 |
| MOL003011 | MOL001490 | MOL003119 | MOL000561 | MOL003297 | MOL004368 |
| MOL003118 | MOL003292 | MOL003014 | MOL009734 | MOL003281 | MOL003327 |
| MOL000357 | MOL008151 | MOL003346 | MOL005368 | MOL003093 | MOL003037 |
| MOL002879 | MOL000009 | MOL003345 | MOL003362 | MOL003284 | MOL002229 |
| MOL003349 | MOL000654 | MOL002931 | MOL002067 | MOL003010 | MOL003015 |
| MOL000396 | MOL003355 | MOL003298 | MOL003290 | MOL001506 | MOL002773 |
| MOL003347 | MOL003121 | MOL000007 | MOL003054 | MOL008595 | MOL002912 |
| MOL003099 | MOL003350 | MOL000663 | MOL003128 | MOL003073 | MOL003116 |
| MOL003101 | MOL002935 | MOL003320 | MOL001982 | MOL003282 | MOL003365 |
| MOL003061 | MOL002918 | MOL001410 | MOL000523 | MOL003111 | MOL003022 |
| MOL003315 | MOL000551 | MOL003367 | MOL002909 | MOL003020 | MOL003318 |
| MOL001680 | MOL002819 | MOL003092 | MOL000286 | MOL005402 | MOL004684 |
| MOL003062 | MOL000263 | MOL000359 | MOL003107 | MOL003048 | MOL003920 |
| MOL009730 | MOL001938 | MOL003356 | MOL002934 | MOL000537 | MOL000211 |
| MOL003283 | MOL010415 | MOL001996 | MOL003374 | MOL003113 | MOL003063 |
| MOL002927 | MOL000511 | MOL001955 | MOL002933 | MOL003122 | MOL000676 |
| MOL003301 | MOL003322 | MOL003059 | MOL003344 | MOL000869 | MOL003324 |
| MOL003036 | MOL000655 | MOL012240 | MOL000458 | MOL003124 | MOL000971 |
| MOL003357 | MOL003308 | MOL003025 | MOL001817 | MOL000868 | MOL003109 |
| MOL001398 | MOL011081 | MOL003306 | MOL000358 | MOL000449 | MOL003018 |
| MOL002737 | MOL001494 | MOL002919 | MOL003055 | MOL003005 | MOL003288 |
| MOL003330 | MOL000860 | MOL000879 | MOL003103 | MOL003096 | MOL003295 |
| MOL003105 | MOL002925 | MOL002915 | MOL001842 | MOL001818 | MOL002917 |
| MOL003299 | MOL006370 | MOL000098 | MOL003326 | MOL003370 | MOL001889 |
| MOL002929 | MOL000525 | MOL003094 | MOL003117 | MOL001495 | MOL000073 |
| MOL003095 | MOL001392 | MOL002911 | MOL012245 | MOL000552 | MOL000006 |
| MOL010206 | MOL012266 | MOL000131 | MOL005272 | MOL003287 | MOL000650 |
| MOL002083 | MOL003016 | MOL003354 | MOL002566 | MOL003291 | MOL000791 |
| MOL005841 | MOL002908 | MOL003053 | MOL002932 | MOL003044 | MOL002926 |
| MOL001641 | MOL000069 | MOL003098 | MOL003329 | MOL002008 | MOL000008 |
| MOL002560 | MOL003120 | MOL000674 | MOL011322 | MOL002936 | MOL003043 |
| MOL008206 | MOL001689 | MOL002914 | MOL000867 | MOL012246 | MOL000173 |
| MOL002928 | MOL003341 | MOL003097 | MOL001393 | MOL000228 | MOL012267 |