Table S4. The top 50 hits in each binding site in SARS-CoV-2 Mpro

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Site II | Site III | Site IV | Site V |
| MOL000415 | MOL000870 | MOL003309 | MOL003130 |
| MOL003130 | MOL008595 | MOL000009 | MOL003336 |
| MOL001875 | MOL005368 | MOL003345 | MOL003284 |
| MOL003051 | MOL003284 | MOL000561 | MOL003334 |
| MOL002921 | MOL003290 | MOL000437 | MOL003285 |
| MOL003316 | MOL003010 | MOL000007 | MOL000536 |
| MOL000010 | MOL000702 | MOL002935 | MOL003309 |
| MOL003118 | MOL009730 | MOL002912 | MOL002702 |
| MOL003332 | MOL000663 | MOL002931 | MOL003030 |
| MOL003334 | MOL002879 | MOL003284 | MOL003020 |
| MOL006370 | MOL003322 | MOL003297 | MOL003118 |
| MOL003313 | MOL005224 | MOL003010 | MOL009734 |
| MOL003013 | MOL002027 | MOL000702 | MOL003327 |
| MOL003010 | MOL003030 | MOL003128 | MOL000357 |
| MOL003336 | MOL002934 | MOL003119 | MOL003292 |
| MOL003116 | MOL000869 | MOL003320 | MOL003035 |
| MOL003331 | MOL009734 | MOL003054 | MOL000654 |
| MOL003296 | MOL000655 | MOL000650 | MOL003297 |
| MOL000870 | MOL000009 | MOL003015 | MOL003005 |
| MOL000536 | MOL002927 | MOL003355 | MOL001410 |
| MOL003076 | MOL003037 | MOL003020 | MOL003296 |
| MOL003352 | MOL003015 | MOL003022 | MOL004368 |
| MOL003018 | MOL003073 | MOL003356 | MOL003324 |
| MOL003290 | MOL003336 | MOL002923 | MOL003009 |
| MOL003020 | MOL002923 | MOL000655 | MOL002707 |
| MOL003305 | MOL003920 | MOL003287 | MOL002229 |
| MOL003128 | MOL003048 | MOL003011 | MOL013161 |
| MOL003284 | MOL003334 | MOL003025 | MOL003305 |
| MOL003345 | MOL000537 | MOL003093 | MOL001875 |
| MOL003030 | MOL000437 | MOL003099 | MOL002921 |
| MOL000523 | MOL003327 | MOL003301 | MOL000702 |
| MOL003292 | MOL002919 | MOL003283 | MOL003054 |
| MOL003327 | MOL000396 | MOL000537 | MOL000007 |
| MOL000654 | MOL002702 | MOL003295 | MOL003307 |
| MOL000561 | MOL008151 | MOL003073 | MOL000663 |
| MOL003320 | MOL004368 | MOL003308 | MOL007792 |
| MOL002037 | MOL002915 | MOL003298 | MOL000009 |
| MOL013161 | MOL003116 | MOL002819 | MOL003022 |
| MOL000007 | MOL000971 | MOL002909 | MOL003298 |
| MOL002912 | MOL003308 | MOL000523 | MOL001490 |
| MOL000437 | MOL003298 | MOL000416 | MOL003011 |
| MOL003121 | MOL003355 | MOL003101 | MOL003093 |
| MOL001680 | MOL002909 | MOL003357 | MOL000396 |
| MOL001410 | MOL002912 | MOL003005 | MOL002027 |
| MOL002707 | MOL002931 | MOL003048 | MOL003076 |
| MOL003101 | MOL003356 | MOL001680 | MOL003059 |
| MOL000357 | MOL003345 | MOL002037 | MOL003301 |
| MOL003297 | MOL001938 | MOL000869 | MOL008595 |
| MOL003298 | MOL001494 | MOL003322 | MOL003345 |
| MOL009734 | MOL003374 | MOL003037 | MOL000010 |