Table S6. The SMILE codes of the selected hits and the Metabolite

|  |  |
| --- | --- |
| MOL ID | SMILE codes |
| MOL003130 | O1C(C2=CC(O)=C(O)C=C2)=C(OC)C(=O)C2C(O)=CC(O[C@@H]3OC(CO[C@H]4OC(CO)C(O)C(O)C4O)C(O)C(O)C3O)=CC1=2 |
| MOL002037 | C12OC(C3=CC(C4=C5OC(C6=CC=C(O)C=C6)=CC(=O)C5=C(O)C=C4O)=C(O)C=C3)=CC(=O)C1=C(O)C=C(O)C=2 |
| MOL000010 | C(O)1=CC=C(C2=CC(=O)C3C(O)=CC(O[C@@H]4O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O[C@H]4[C@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](C)O4)=CC=3O2)C=C1 |
| MOL003008 | C1=C(O)C(O)=CC(C2=C(OC3C(O)C(O)C(O)[C@@H](COC4C(O)C(O)C(O)[C@H](COC(=O)/C=C\C5=CC(O)=C(O)C=C5)O4)O3)C(=O)C3C(O)=CC(O)=CC=3O2)=C1 |
| MOL003337 | C(O)1=CC=C(CCOC2C(O)C(O[C@@H]3C(O)C(O)C(O)C(C)O3)C(OC(=O)/C=C\C3=CC=C(O)C(O)=C3)C(CO[C@H]3OCC(O)C(O)C3O)O2)C=C1O |
| MOL003332 | C1=C(O)C(O)=CC(/C=C\C(O[C@H]2C(O)C(O)C(OC[C@H](C3=CC(O)=C(O)C=C3)O)OC2CO[C@@H]2OC(C)C(O)C(O)C2O)=O)=C1 |
| MOL003316 | C(O)1=CC=C([C@@H](COC2C(O)C(O[C@@H]3OC(C)C(O)C(O)C3O)C(OC(/C=C/C3=CC=C(O)C(O)=C3)=O)C(CO)O2)O)C=C1O |
| MOL003313 | C(O)1=C(O)C=C(C2COC3OC(CO[C@@H]4OC(C)C(O)C(O)C4O)C(OC(=O)/C=C/C4=CC(O)=C(O)C=C4)C(O)[C@@H]3O2)C=C1 |
| MOL003013 | C(O)1C(O)C(CO)O[C@@H](OC2OC=C(C(=O)OC)C(CC(OCCCCC)OCCCCC)C2C=C)C1O |
| MOL000415 | C(O)1=CC=C(C2=C(O[C@@H]3O[C@H](CO[C@H]4[C@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](C)O4)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)C(=O)C3C(O)=CC(O)=CC=3O2)C=C1O |
| MOL001875 | C(O)1=C(O)C=C(/C=C/C(=O)OC2C(O)C(OC(/C=C/C3=CC=C(O)C(O)=C3)=O)CC(C(=O)O)(O)C2)C=C1 |
| MOL003051 | C(O)1=CC=C(C2=CC(=O)C3C(O)=CC(O[C@@H]4O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O[C@H]4[C@H](O)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H](C)O4)=CC=3O2)C=C1O |
| MOL003336 | C(O)1C(O)C(C)OC(OC[C@H]2C(O)C(O)C(O)C(OCCC3=CC=C(O)C(O)=C3)O2)C1O |
| MOL003284 | C(O)1=C(O)C=CC(CCOC2C(O)C(O)[C@H](OC(=O)/C=C/C3=CC=C(O)C(O)=C3)C(CO)O2)=C1 |
| MOL003334 | C(O)1=C(O)C=C(C(COC2C(O)C(O)C(O)[C@H](COC3C(O)C(O)C(O)C(C)O3)O2)O)C=C1 |
| Metabolite | C(O)1=C(O)C=CC(C2=C(OC)C(=O)C3C(O)=CC(O)=CC=3O2)=C1 |