

Compound SMILES    Top1 cleav: TDP1 inhibi HCT116 GI DU145 GI5 MCF-7 GI5(A549 GI50( MCF-7/TDP

A1	O=C1C2=C(+		0	1.27	jÀ	0.1	25.21	jÀ	0.	14.49	jÀ	1.	10.98	jÀ	0.95				
A2	O=C1C2=C(+		0	6.79	jÀ	0.5	10.88	jÀ	0.	13.01	jÀ	3.	11.86	jÀ	2.08				
A3	O=C1C2=C(+		0	3.22	jÀ	0.1	15.39	jÀ	0.	83.26	jÀ	5.	2.61	jÀ	0.39				
A4	O=C1C2=C(+		0	5.66	jÀ	1.2	24.98	jÀ	0.	13.20	jÀ	0.	4.96	jÀ	0.68				
A5	O=C1C2=C(+		0	6.92	jÀ	0.2	27.15	jÀ	0.	11.67	jÀ	0.	11.95	jÀ	0.84				
A6	O=C1C2=C(	0	0	94.05	jÀ	1.	3.53	jÀ	1.9	91.30	jÀ	5.	65.14	jÀ	8.90				
A7	O=C1C2=C(	0	22%	12.18	jÀ	1.	60.27	jÀ	0.	54.67	jÀ	4.	12.18	jÀ	1.54				
A8	O=C1C2=C(+		57%	0.78	jÀ	0.1	15.57	jÀ	0.	63.56	jÀ	13	2.75	jÀ	0.11				
A9	O=C1C2=C(+		0	2.18	jÀ	0.1	3.77	jÀ	0.0	9.71	jÀ	2.4	0.94	jÀ	0.06				
A10	O=C1C2=C(+		42%	6.55	jÀ	0.6	12.34	jÀ	0.	2.28	jÀ	0.6	6.41	jÀ	0.34				
A11	O=C1C2=C(	0	0	13.24	jÀ	2.	18.17	jÀ	0.	7.26	jÀ	1.8	17.05	jÀ	0.92				
A12	O=C1C2=C(ND	ND	9.84	jÀ	0.8	6.72	jÀ	0.2	21.69	jÀ	4.	17.72	jÀ	1.70					
A13	O=C1C2=C(O/+	15	jÀ	2.2	6.93	jÀ	0.4	1.88	jÀ	0.1	2.65	jÀ	0.1	6.68	jÀ	0.31			
B1	O=C1C2=C(+		0	2.01	jÀ	0.1	9.94	jÀ	0.6	8.85	jÀ	1.1	0.79	jÀ	0.08				
B2	O=C1C2=C(+	26	jÀ	0.75	6.34	jÀ	0.8	17.38	jÀ	0.	10.98	jÀ	0.	12.31	jÀ	0.73			
B3	O=C1C2=C(+	12%	49.77	jÀ	6.	68.10	jÀ	18	5.20	jÀ	1.6	13.07	jÀ	2.82					
B4	O=C1C2=C(	0	0	12.90	jÀ	0.	30.97	jÀ	0.	10.61	jÀ	2.	8.58	jÀ	0.55				
B5	O=C1C2=C(++		0	11.10	jÀ	0.	2.04	jÀ	0.5	81.31	jÀ	2.	65.53	jÀ	7.45				
B6	O=C1C2=C(+	49%	4.17	jÀ	1.1	20.46	jÀ	0.	2.73	jÀ	0.8	3.78	jÀ	0.44					
B7	O=C1C2=C(+	15%	1.26	jÀ	0.0	1.41	jÀ	0.5	0.53	jÀ	0.0	1.22	jÀ	0.14					
B8	O=C1C2=C(	0	0	9.76	jÀ	0.6	4.51	jÀ	0.7	2.26	jÀ	0.0	2.33	jÀ	0.76				
C1	O=C1C2=C(+		0	1.13	jÀ	0.0	0.86	jÀ	0.0	1.51	jÀ	0.2	6.66	jÀ	0.08				
C2	O=C1C2=C(+++		0	0.93	jÀ	0.1	0.28	jÀ	0.0	1.44	jÀ	0.2	7.95	jÀ	0.37				
C3	O=C1C2=C(	0	0	10.12	jÀ	0.	11.68	jÀ	0.	5.44	jÀ	0.5	6.87	jÀ	1.11				
C4	O=C1C2=C(+++		0	0.24	jÀ	0.0	0.91	jÀ	0.0	0.57	jÀ	0.0	2.40	jÀ	0.36				
C5	O=C1C2=C(++++)	ND	1.18	jÀ	0.1	0.32	jÀ	0.0	2.99	jÀ	0.0	3.13	jÀ	0.82					
C6	O=C1C2=C(++		0	4.35	jÀ	0.7	3.82	jÀ	0.9	10.30	jÀ	2.	9.27	jÀ	0.32				
C7	O=C1C2=C(+++		0	2.92	jÀ	0.7	0.52	jÀ	0.0	10.18	jÀ	0.	2.28	jÀ	0.88				
C8	O=C1C2=C(+++		0	0.14	jÀ	0.0	0.32	jÀ	0.0	0.20	jÀ	0.0	1.61	jÀ	0.06				
C9	O=C1C2=C(++		0	5.21	jÀ	0.2	1.00	jÀ	0.0	12.74	jÀ	0.	1.49	jÀ	0.14				
C10	O=C1C2=C(+	27	jÀ	0.51	8.41	jÀ	0.2	4.13	jÀ	0.8	8.54	jÀ	0.9	12.21	jÀ	0.59			
C11	O=C1C2=C(	0	0	13.41	jÀ	0.	40.21	jÀ	0.	21.76	jÀ	7.	12.81	jÀ	0.83				
C12	O=C1C2=C(+++	19	jÀ	0.91	1.44	jÀ	0.2	0.80	jÀ	0.0	0.77	jÀ	0.1	1.11	jÀ	0.0	2.59	jÀ	0.3
C13	O=C1C2=C(+	15	jÀ	0.31	4.38	jÀ	0.6	0.44	jÀ	0.0	0.53	jÀ	0.0	3.09	jÀ	1.17			
C14	O=C1C2=C(+++		0	2.79	jÀ	0.1	1.22	jÀ	0.0	3.24	jÀ	0.1	10.35	jÀ	0.17				
C15	O=C1C2=C(+	49%	4.21	jÀ	0.8	3.27	jÀ	0.8	6.95	jÀ	1.9	1.86	jÀ	0.93					
C16	O=C1C2=C(+		0	0.90	jÀ	0.0	6.61	jÀ	0.3	2.79	jÀ	0.2	3.35	jÀ	0.40				
C17	O=C1C2=C(	0	0	41.56	jÀ	4.	7.88	jÀ	1.1	42.20	jÀ	2.	34.71	jÀ	2.26				
C18	O=C1C2=C(+		0	9.35	jÀ	0.6	1.14	jÀ	0.4	>100		>100							
C19	O=C1C2=C(+	53	jÀ	1.5	0.63	jÀ	0.1	3.11	jÀ	2.7	6.26	jÀ	3.0	3.93	jÀ	0.73			
C20	O=C1C2=C(+		0	8.48	jÀ	0.3	>100		93.35	jÀ	3.	84.94	jÀ	1.82					
C21	O=C1C2=C(	0	0	26.17	jÀ	0.	71.73	jÀ	0.	24.40	jÀ	6.	40.45	jÀ	0.95				
C22	O=C1C2=C(	0	0	11.31	jÀ	0.	11.25	jÀ	0.	>100		2.79	jÀ	0.35					
C23	O=C1C2=C(+		0	11.56	jÀ	1.	15.78	jÀ	4.	24.63	jÀ	5.	23.74	jÀ	1.89				
C24	O=C1C2=C(	0	0	>100		2.90	jÀ	0.8	7.22	jÀ	2.3	12.71	jÀ	3.61					
C25	O=C1C2=C(O/+	54	jÀ	1.0	10.15	jÀ	0.	0.26	jÀ	0.0	10.72	jÀ	0.	40.35	jÀ	1.	.96		

C26	O=C1C2=C(O/+	19 jÀ 0.35 9.93 jÀ 0.3 25.43 jÀ 0. 0.35 jÀ 0.0 1.53 jÀ 1.10
C27	O=C1C2=C(	0 0 > 100 > 100 > 100 66.61 jÀ 1.92
C28	O=C1C2=C(O/+	0 12.88 jÀ 0. 41.67 jÀ 0. 2.70 jÀ 0.7 10.81 jÀ 0.81
C29	O=C1C2=C(+	44% 1.21 jÀ 0.6 0.29 jÀ 0.0 1.66 jÀ 0.2 1.76 jÀ 0.39
C30	O=C1C2=C(++	0 26.19 jÀ 2. 15.40 jÀ 0. 3.62 jÀ 0.3 8.47 jÀ 0.76

'1 GI50(1M)