

Protein	#	Ligands	Seq. Ident.	Rel. Ident.	Hs Ident.	Vol. (Å ³)	Area (Å ²)	Res. (Å)	Score
PNP	1	inhibitor (IMH)	1.00	1.25	0.56	590	513	2.20	-2.95
PNP	2		1.00	1.25	0.50	274	290	2.20	-2.56
LDH	1		1.00	1.07	0.56	466	406	1.70	-2.49
ENR*	1	inhibitor (TCC)	1.00	1.17	0.57	410	362	2.35	-2.47
TIM	1		0.94	1.17	0.81	448	407	1.10	-2.45
DHFR-TS*	3	inhibitor (WRA)	1.00	1.25	0.79	432	375	2.33	-2.35
HGXPRT	3		1.00	1.25	0.75	269	323	2.00	-2.29
PNP	3		1.00	1.25	0.50	174	323	2.20	-2.18
PM2	1	inhibitor (R37)	0.88	1.28	0.80	518	485	1.80	-2.15
AdSS	3	product (GDP)	0.95	1.23	0.82	396	442	2.00	-2.06
LDH	2	inhibitor (OXQ), cofactor	1.00	1.07	0.76	420	390	1.70	-1.88
KinI	2		1.00	1.10	0.65	263	297	1.60	-1.83
AdSS	2		0.94	1.22	0.83	469	348	2.00	-1.65
GR	4		1.00	1.16	0.71	269	416	2.60	-1.57
ENR*	2		0.94	1.10	0.63	381	412	2.35	-1.57
ENR*	3		1.00	1.17	0.64	232	298	2.35	-1.56
KinI	1		1.00	1.10	0.85	442	464	1.60	-1.54
ACBP	1	payload (COA), payload (MYR)	0.85	1.22	0.77	318	367	2.00	-1.41
DHFR-TS*	7		1.00	1.25	0.69	210	210	2.33	-1.36
ENR	2		0.94	1.10	0.63	295	355	2.35	-1.23
DHFR-TS	6		1.00	1.25	0.69	197	201	2.33	-1.22
DHFR-TS*	6		0.95	1.20	0.73	216	315	2.33	-1.20
GR*	3		0.96	1.12	0.79	452	442	2.60	-1.15
AdSS	6		1.00	1.29	0.67	142	159	2.00	-1.10
GR	3		0.96	1.11	0.75	374	356	2.60	-1.06
GST	3		1.00	1.17	0.50	183	201	2.20	-1.04
ENR*	4		1.00	1.17	0.56	170	230	2.35	-0.97
AdSS	1		0.83	1.08	0.67	488	541	2.00	-0.92
PM2	3		0.90	1.32	0.60	123	149	1.80	-0.73
DHFR-TS*	4		0.88	1.10	0.56	283	293	2.33	-0.68
LDH	4		1.00	1.07	0.64	171	222	1.70	-0.67
DHFR-TS	4		0.88	1.10	0.56	263	279	2.33	-0.53
ENR	3		1.00	1.17	0.75	174	227	2.35	-0.49
ENR	4		1.00	1.17	0.50	120	188	2.35	-0.40
PK5	3		1.00	1.10	0.50	156	167	1.90	-0.39
CyP	2		1.00	1.10	0.75	185	223	2.10	-0.27
DHFR-TS*	8		0.89	1.11	0.61	194	264	2.33	-0.21
ENR*	6		1.00	1.17	0.50	124	160	2.35	-0.19
GR*	2		0.96	1.11	0.75	518	712	2.60	-0.19
DHFR-TS*	10		0.95	1.19	0.65	149	183	2.33	-0.15
DHFR-TS	2		0.81	1.02	0.56	556	572	2.33	-0.13
GR	7		1.00	1.16	0.50	117	178	2.60	-0.01
Trx	1		0.91	1.00	0.64	316	374	2.95	0.00
GST	2		0.92	1.07	0.67	227	220	2.20	0.01
DHFR-TS	7		0.89	1.11	0.61	174	246	2.33	0.02
DHFR-TS	9		0.95	1.19	0.65	134	168	2.33	0.08
DHFR-TS*	1		0.81	1.02	0.56	599	599	2.33	0.11
PK5	2		0.94	1.04	0.83	281	266	1.90	0.13
DHFR-TS*	5		0.93	1.16	0.86	244	281	2.33	0.14
TIM	3		0.81	1.01	0.69	166	286	1.10	0.18
TIM	2	inhibitor (2PG)	0.92	1.14	0.92	345	375	1.10	0.31

PGK	3		1.00	1.14	0.85	217	313	3.00	0.32
PDF	1	inhibitors (BRR, BL5)	0.94	1.11	0.88	293	285	2.18	0.35
ENR	1	inhibitor (TCC), cofactor	0.98	1.15	0.58	862	663	2.35	0.37
Rab6	2		1.00	1.01	0.67	153	225	2.30	0.38
KinI	5		1.00	1.10	0.83	140	192	1.60	0.43
PGK	1		0.92	1.04	0.83	457	527	3.00	0.43
TIM	4		0.90	1.11	0.80	115	184	1.10	0.49
DHFR-TS	13		0.92	1.15	0.58	115	174	2.33	0.52
Fd	2		1.00	1.08	0.70	103	149	1.70	0.53
ALDO	11		0.90	1.01	0.70	231	372	3.00	0.58
GR	6		1.00	1.16	0.67	123	139	2.60	0.58
DHFR-TS*	2	substrate (UMP)	0.98	1.22	0.93	471	528	2.33	0.66
Pfg27	2		0.63	1.01	0.59	367	389	2.10	0.72
DHFR-TS	5		1.00	1.25	0.92	224	266	2.33	0.75
GR*	5		1.00	1.16	0.80	140	153	2.60	0.91
ALDO	13		1.00	1.12	0.83	207	202	3.00	0.96
PGK	5		0.94	1.07	0.75	170	236	3.00	1.09
KinI	4		0.86	0.94	0.64	162	213	1.60	1.10
ALDO	12		1.00	1.12	0.88	223	247	3.00	1.15
CyP	1	coinhibitor (CsA)	1.00	1.10	0.92	271	288	2.10	1.22
ALDO	8		0.80	0.89	0.60	359	364	3.00	1.23
ALDO	14		1.00	1.12	0.83	160	195	3.00	1.31
GR	5		1.00	1.16	0.91	217	262	2.60	1.36
LDH	3		0.75	0.80	0.75	406	344	1.70	1.45
ALDO	9		0.90	1.01	0.85	295	312	3.00	1.45
DHFR-TS*	12		0.83	1.04	0.50	132	174	2.33	1.46
PGK	8		0.92	1.04	0.67	148	193	3.00	1.54
Pfg27	1		0.57	0.92	0.64	427	465	2.10	1.58
PM2	5		0.75	1.10	0.63	104	171	1.80	1.62
KinI	6		0.90	0.99	0.60	110	118	1.60	1.62
GST	1	inhibitor (GTX)	1.00	1.17	0.64	789	889	2.20	1.65
DHFR-TS*	14		0.83	1.04	0.50	124	159	2.33	1.65
TIM	5		0.83	1.03	0.75	112	128	1.10	1.66
DHFR-TS	3	substrate (UMP)	1.00	1.25	0.95	380	427	2.33	1.73
PM2	2		0.60	0.88	0.50	300	320	1.80	1.73
ALDO	15		1.00	1.12	0.83	127	168	3.00	1.76
AdSS	5		0.75	0.97	0.63	174	210	2.00	1.81
Trx	2		1.00	1.10	0.80	118	141	2.95	1.87
Fd	1		0.88	0.94	0.50	107	133	1.70	1.90
DHFR-TS	1	inhibitor (WRA), cofactor (NDP)	0.95	1.19	0.76	905	757	2.33	1.92
ALDO	16		0.92	1.02	0.58	119	165	3.00	1.93
DHFR-TS*	16		0.83	1.04	0.50	111	129	2.33	2.02
DHFR-TS	8		0.81	1.02	0.75	158	186	2.33	2.05
DHFR-TS	14		0.81	1.02	0.50	110	149	2.33	2.14
DHFR-TS	12		0.80	1.00	0.50	118	162	2.33	2.15
DHFR-TS	16		0.83	1.04	0.50	103	122	2.33	2.16
GR*	4		0.90	1.04	0.80	151	151	2.60	2.21
DHFR-TS*	9		0.78	0.97	0.72	173	196	2.33	2.25
PDF	2		0.92	1.09	0.83	104	129	2.18	2.31
DHFR-TS*	11		0.75	0.94	0.50	145	205	2.33	2.32
DHFR-TS	10		0.75	0.94	0.50	129	191	2.33	2.54
Pfg27	4		0.64	1.04	0.50	124	173	2.10	2.55
PGK	4		0.88	1.00	0.81	173	178	3.00	2.72

GR	2	cofactor (FAD)	0.95	1.11	0.86	841	743	2.60	2.83
PK5	4		0.95	1.04	0.90	122	156	1.90	2.92
Pfg27	3		0.63	1.01	0.50	126	148	2.10	3.04
ENR	5		0.80	0.94	0.60	106	129	2.35	3.13
ENR*	5		0.75	0.88	0.58	129	147	2.35	3.43
ALDO	7		1.00	1.12	0.95	522	470	3.00	3.46
ENR*	7		0.75	0.88	0.67	118	164	2.35	3.54
Pfg27	5		0.64	1.04	0.79	115	148	2.10	3.60
Rab6	1	product (GDP)	1.00	1.01	0.95	349	357	2.30	3.75
AdSS	4	reaction intermediate (IMO), substrate analogue	1.00	1.29	0.96	333	278	2.00	3.76
ALDO	10		0.67	0.74	0.67	259	231	3.00	4.09
PGK	2	substrate analogue (AMP)	1.00	1.14	0.95	344	328	3.00	4.19
GR	8		0.75	0.87	0.75	111	160	2.60	4.20
DHFR-TS*	13		0.67	0.84	0.50	127	129	2.33	4.27
PGK	6		0.81	0.92	0.88	155	201	3.00	4.28
DHFR-TS*	15		0.67	0.84	0.67	121	157	2.33	4.35
DHFR-TS	11		0.67	0.84	0.50	119	123	2.33	4.39
DHFR-TS	15		0.60	0.75	0.70	108	147	2.33	5.60
Pfg27	7		0.50	0.81	0.50	102	117	2.10	5.61
Pfg27	6		0.50	0.81	0.67	107	132	2.10	5.71
PM2	4		0.50	0.73	0.50	105	128	1.80	5.72
GR	1		1.00	1.16	0.69	1284	1259	2.60	15.88
HGXPRT	1		0.77	0.96	0.63	1976	2117	2.00	68.77
GR*	1		0.99	1.15	0.76	2358	2320	2.60	93.20
HGXPRT	2	inhibitor (IRP), substrate analogue	1.00	1.25	1.00	385	320	2.00	2889.
PK5	1	inhibitor (INR)	1.00	1.10	1.00	530	484	1.90	2889.
KinI	3		1.00	1.10	1.00	206	230	1.60	2890.
PGK	7		1.00	1.14	1.00	148	168	3.00	2892.
PK5	5		1.00	1.10	1.00	100	118	1.90	2892.

Supplementary Table 1. List of all 133 pockets from the 21 protein structures ranked by drugability score. Starred (*) protein names indicate pockets in which a cofactor was included in the template structure.