

Supplementary file #3

All attributes, used in Weka NN modeling, are summarized below. Autodock scores were used as is, and Xscore values have been transformed according to:

$$\text{New Xscore} = 1.364 \times \text{Log}(10^{-\text{Raw Xscore}})$$

Ki or IC50 are previously reported values

Compound: 10,11-dihydroquinidine

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1

Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 3

Num_H_Donors: 2 Molecular_Weight: 327.44058

ALogP: 1.563 Num_Rotatable_Bonds: 5

CYP2D6_1_autodock: -5.79	CYP2D6_1_xscore: -8.44316
CYP2D6_2_autodock: -5.38	CYP2D6_2_xscore: -8.55228
CYP2D6_3_autodock: -5.42	CYP2D6_3_xscore: -8.6614
CYP2D6_4_autodock: -6.30	CYP2D6_4_xscore: -8.36132
CYP2D6_5_autodock: -4.39	CYP2D6_5_xscore: -8.44316
CYP2D6_6_autodock: -5.28	CYP2D6_6_xscore: -7.843
CYP2D6_7_autodock: -5.27	CYP2D6_7_xscore: -8.15672
CYP2D6_8_autodock: -4.80	CYP2D6_8_xscore: -8.15672
CYP2D6_9_autodock: -6.16	CYP2D6_9_xscore: -8.29312
CYP2D6_10_autodock: -5.62	CYP2D6_10_xscore: -8.2522
CYP2D6_11_autodock: -4.28	CYP2D6_11_xscore: -8.74324
CYP2D6_12_autodock: -5.84	CYP2D6_12_xscore: -8.49772
CYP2D6_13_autodock: -5.48	CYP2D6_13_xscore: -8.41588
CYP2D6_14_autodock: -5.63	CYP2D6_14_xscore: -8.5932
CYP2D6_15_autodock: -3.91	CYP2D6_15_xscore: -8.3886
CYP2D6_16_autodock: -5.40	CYP2D6_16_xscore: -8.3204
CYP2D6_17_autodock: -5.03	CYP2D6_17_xscore: -8.42952
CYP2D6_18_autodock: -5.67	CYP2D6_18_xscore: -8.4568
CYP2D6_19_autodock: -6.91	CYP2D6_19_xscore: -8.29312
CYP2D6_20_autodock: -5.90	CYP2D6_20_xscore: -8.33404

Ki or IC50 = 0.066

Compound: 10,11-dihydroquinine

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1

Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 3

Num_H_Donors: 2 Molecular_Weight: 327.44058

ALogP: 1.563 Num_Rotatable_Bonds: 5

CYP2D6_1_autodock: -5.97	CYP2D6_1_xscore: -8.47044
CYP2D6_2_autodock: -6.51	CYP2D6_2_xscore: -8.3204
CYP2D6_3_autodock: -5.55	CYP2D6_3_xscore: -8.71596
CYP2D6_4_autodock: -6.24	CYP2D6_4_xscore: -8.4568
CYP2D6_5_autodock: -3.86	CYP2D6_5_xscore: -8.47044
CYP2D6_6_autodock: -5.38	CYP2D6_6_xscore: -8.10216

CYP2D6_7_autodock: -5.34	CYP2D6_7_xscore: -8.5932
CYP2D6_8_autodock: -7.05	CYP2D6_8_xscore: -8.23856
CYP2D6_9_autodock: -7.70	CYP2D6_9_xscore: -8.184
CYP2D6_10_autodock: -6.89	CYP2D6_10_xscore: -8.22492
CYP2D6_11_autodock: -3.77	CYP2D6_11_xscore: -8.36132
CYP2D6_12_autodock: -5.49	CYP2D6_12_xscore: -8.44316
CYP2D6_13_autodock: -6.40	CYP2D6_13_xscore: -8.49772
CYP2D6_14_autodock: -6.45	CYP2D6_14_xscore: -8.23856
CYP2D6_15_autodock: -4.46	CYP2D6_15_xscore: -8.15672
CYP2D6_16_autodock: -5.19	CYP2D6_16_xscore: -8.2522
CYP2D6_17_autodock: -6.11	CYP2D6_17_xscore: -8.87964
CYP2D6_18_autodock: -5.44	CYP2D6_18_xscore: -8.47044
CYP2D6_19_autodock: -7.74	CYP2D6_19_xscore: -8.36132
CYP2D6_20_autodock: -5.68	CYP2D6_20_xscore: -8.06124

Ki or IC50 = 4.0

Compound: 19-epiajmalicine

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1
Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 3
Num_H_Donors: 2 Molecular_Weight: 353.4348
ALogP: 1.183 Num_Rotatable_Bonds: 2

CYP2D6_1_autodock: -11.56	CYP2D6_1_xscore: -8.44316
CYP2D6_2_autodock: -10.46	CYP2D6_2_xscore: -8.5932
CYP2D6_3_autodock: -8.79	CYP2D6_3_xscore: -8.34768
CYP2D6_4_autodock: -12.66	CYP2D6_4_xscore: -8.57956
CYP2D6_5_autodock: -8.37	CYP2D6_5_xscore: -8.3204
CYP2D6_6_autodock: -10.38	CYP2D6_6_xscore: -8.1158
CYP2D6_7_autodock: -10.00	CYP2D6_7_xscore: -8.4568
CYP2D6_8_autodock: -6.58	CYP2D6_8_xscore: -8.27948
CYP2D6_9_autodock: -11.37	CYP2D6_9_xscore: -8.21128
CYP2D6_10_autodock: -11.06	CYP2D6_10_xscore: -8.42952
CYP2D6_11_autodock: -8.80	CYP2D6_11_xscore: -8.56592
CYP2D6_12_autodock: -9.54	CYP2D6_12_xscore: -8.22492
CYP2D6_13_autodock: -10.84	CYP2D6_13_xscore: -8.41588
CYP2D6_14_autodock: -10.69	CYP2D6_14_xscore: -8.70232
CYP2D6_15_autodock: -11.30	CYP2D6_15_xscore: -8.37496
CYP2D6_16_autodock: -10.09	CYP2D6_16_xscore: -8.60684
CYP2D6_17_autodock: -7.18	CYP2D6_17_xscore: -8.03396
CYP2D6_18_autodock: -9.09	CYP2D6_18_xscore: -8.3204
CYP2D6_19_autodock: -10.04	CYP2D6_19_xscore: -8.41588
CYP2D6_20_autodock: -6.96	CYP2D6_20_xscore: -8.06124

Ki or IC50 = 0.017

Compound: 1a

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1
Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 2

Num_H_Donors: 3 Molecular_Weight: 325.4247

ALogP: 0.723 Num_Rotatable_Bonds: 2

CYP2D6_1_autodock: -10.69	CYP2D6_1_xscore: -8.26584
CYP2D6_2_autodock: -8.85	CYP2D6_2_xscore: -8.36132
CYP2D6_3_autodock: -7.45	CYP2D6_3_xscore: -8.184
CYP2D6_4_autodock: -11.64	CYP2D6_4_xscore: -8.42952
CYP2D6_5_autodock: -9.50	CYP2D6_5_xscore: -8.7296
CYP2D6_6_autodock: -10.09	CYP2D6_6_xscore: -8.184
CYP2D6_7_autodock: -8.46	CYP2D6_7_xscore: -8.3886
CYP2D6_8_autodock: -7.09	CYP2D6_8_xscore: -8.12944
CYP2D6_9_autodock: -9.95	CYP2D6_9_xscore: -8.184
CYP2D6_10_autodock: -10.31	CYP2D6_10_xscore: -8.42952
CYP2D6_11_autodock: -6.73	CYP2D6_11_xscore: -8.29312
CYP2D6_12_autodock: -9.71	CYP2D6_12_xscore: -8.19764
CYP2D6_13_autodock: -9.73	CYP2D6_13_xscore: -8.10216
CYP2D6_14_autodock: -10.08	CYP2D6_14_xscore: -8.67504
CYP2D6_15_autodock: -9.60	CYP2D6_15_xscore: -8.5932
CYP2D6_16_autodock: -10.79	CYP2D6_16_xscore: -8.7296
CYP2D6_17_autodock: -10.09	CYP2D6_17_xscore: -8.63412
CYP2D6_18_autodock: -10.69	CYP2D6_18_xscore: -8.42952
CYP2D6_19_autodock: -9.31	CYP2D6_19_xscore: -8.23856
CYP2D6_20_autodock: -7.56	CYP2D6_20_xscore: -8.10216

Ki or IC50 = 1.1

Compound: 1c

FormalCharge: 0 Num_PositiveAtoms: 1

Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 2

Num_H_Donors: 2 Molecular_Weight: 351.4421

ALogP: 1.15 Num_Rotatable_Bonds: 2

CYP2D6_1_autodock: -11.73	CYP2D6_1_xscore: -8.74324
CYP2D6_2_autodock: -10.57	CYP2D6_2_xscore: -8.34768
CYP2D6_3_autodock: -8.69	CYP2D6_3_xscore: -8.19764
CYP2D6_4_autodock: -12.86	CYP2D6_4_xscore: -8.67504
CYP2D6_5_autodock: -10.08	CYP2D6_5_xscore: -9.0024
CYP2D6_6_autodock: -10.42	CYP2D6_6_xscore: -8.40224
CYP2D6_7_autodock: -10.93	CYP2D6_7_xscore: -8.85236
CYP2D6_8_autodock: -6.24	CYP2D6_8_xscore: -8.29312
CYP2D6_9_autodock: -11.69	CYP2D6_9_xscore: -8.27948
CYP2D6_10_autodock: -11.11	CYP2D6_10_xscore: -8.63412
CYP2D6_11_autodock: -9.70	CYP2D6_11_xscore: -8.56592
CYP2D6_12_autodock: -8.94	CYP2D6_12_xscore: -8.14308
CYP2D6_13_autodock: -10.11	CYP2D6_13_xscore: -8.74324
CYP2D6_14_autodock: -11.07	CYP2D6_14_xscore: -8.56592
CYP2D6_15_autodock: -10.37	CYP2D6_15_xscore: -8.41588
CYP2D6_16_autodock: -11.09	CYP2D6_16_xscore: -8.64776
CYP2D6_17_autodock: -9.72	CYP2D6_17_xscore: -8.5932

CYP2D6_18_autodock: -9.88 CYP2D6_18_xscore: -8.42952
CYP2D6_19_autodock: -10.28 CYP2D6_19_xscore: -8.55228
CYP2D6_20_autodock: -10.38 CYP2D6_20_xscore: -8.67504
Ki or IC50 = 2.9

Compound: 4a

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1
Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 4
Num_H_Donors: 4 Molecular_Weight: 357.4235
ALogP: 0.882 Num_Rotatable_Bonds: 4

CYP2D6_1_autodock: -11.22	CYP2D6_1_xscore: -8.57956
CYP2D6_2_autodock: -7.91	CYP2D6_2_xscore: -8.03396
CYP2D6_3_autodock: -10.87	CYP2D6_3_xscore: -8.71596
CYP2D6_4_autodock: -11.04	CYP2D6_4_xscore: -8.41588
CYP2D6_5_autodock: -8.51	CYP2D6_5_xscore: -8.90692
CYP2D6_6_autodock: -10.89	CYP2D6_6_xscore: -8.3204
CYP2D6_7_autodock: -9.80	CYP2D6_7_xscore: -8.40224
CYP2D6_8_autodock: -7.53	CYP2D6_8_xscore: -8.33404
CYP2D6_9_autodock: -11.22	CYP2D6_9_xscore: -8.3886
CYP2D6_10_autodock: -11.61	CYP2D6_10_xscore: -9.01604
CYP2D6_11_autodock: -9.33	CYP2D6_11_xscore: -8.75688
CYP2D6_12_autodock: -10.45	CYP2D6_12_xscore: -8.42952
CYP2D6_13_autodock: -10.01	CYP2D6_13_xscore: -8.6614
CYP2D6_14_autodock: -9.69	CYP2D6_14_xscore: -8.82508
CYP2D6_15_autodock: -10.35	CYP2D6_15_xscore: -8.36132
CYP2D6_16_autodock: -9.70	CYP2D6_16_xscore: -8.64776
CYP2D6_17_autodock: -8.79	CYP2D6_17_xscore: -8.33404
CYP2D6_18_autodock: -11.45	CYP2D6_18_xscore: -8.49772
CYP2D6_19_autodock: -11.00	CYP2D6_19_xscore: -8.49772
CYP2D6_20_autodock: -6.01	CYP2D6_20_xscore: -8.1158

Ki or IC50 = 6.3

Compound: 6'-chlorcinchonidine

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1
Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 2
Num_H_Donors: 2 Molecular_Weight: 329.84378
ALogP: 1.853 Num_Rotatable_Bonds: 4

CYP2D6_1_autodock: -6.72	CYP2D6_1_xscore: -8.60684
CYP2D6_2_autodock: -6.87	CYP2D6_2_xscore: -8.56592
CYP2D6_3_autodock: -6.42	CYP2D6_3_xscore: -8.89328
CYP2D6_4_autodock: -5.88	CYP2D6_4_xscore: -8.68868
CYP2D6_5_autodock: -6.27	CYP2D6_5_xscore: -8.89328
CYP2D6_6_autodock: -5.28	CYP2D6_6_xscore: -8.19764
CYP2D6_7_autodock: -5.97	CYP2D6_7_xscore: -8.71596
CYP2D6_8_autodock: -5.59	CYP2D6_8_xscore: -8.525
CYP2D6_9_autodock: -6.45	CYP2D6_9_xscore: -8.41588

CYP2D6_10_autodock: -7.07	CYP2D6_10_xscore: -8.40224
CYP2D6_11_autodock: -4.60	CYP2D6_11_xscore: -8.9342
CYP2D6_12_autodock: -5.06	CYP2D6_12_xscore: -8.78416
CYP2D6_13_autodock: -6.07	CYP2D6_13_xscore: -8.75688
CYP2D6_14_autodock: -5.12	CYP2D6_14_xscore: -8.67504
CYP2D6_15_autodock: -5.09	CYP2D6_15_xscore: -8.68868
CYP2D6_16_autodock: -5.54	CYP2D6_16_xscore: -8.184
CYP2D6_17_autodock: -5.74	CYP2D6_17_xscore: -9.09788
CYP2D6_18_autodock: -5.74	CYP2D6_18_xscore: -8.53864
CYP2D6_19_autodock: -7.34	CYP2D6_19_xscore: -8.56592
CYP2D6_20_autodock: -6.63	CYP2D6_20_xscore: -8.68868

Ki or IC50 = 3.5

Compound: 6'-chlorcinchonine

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1
Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 2
Num_H_Donors: 2 Molecular_Weight: 329.84378
ALogP: 1.853 Num_Rotatable_Bonds: 4

CYP2D6_1_autodock: -5.09	CYP2D6_1_xscore: -8.5932
CYP2D6_2_autodock: -4.38	CYP2D6_2_xscore: -8.41588
CYP2D6_3_autodock: -6.07	CYP2D6_3_xscore: -8.70232
CYP2D6_4_autodock: -6.26	CYP2D6_4_xscore: -8.74324
CYP2D6_5_autodock: -4.63	CYP2D6_5_xscore: -8.75688
CYP2D6_6_autodock: -5.73	CYP2D6_6_xscore: -8.184
CYP2D6_7_autodock: -5.05	CYP2D6_7_xscore: -9.01604
CYP2D6_8_autodock: -5.49	CYP2D6_8_xscore: -8.3886
CYP2D6_9_autodock: -6.31	CYP2D6_9_xscore: -8.44316
CYP2D6_10_autodock: -5.46	CYP2D6_10_xscore: -8.3886
CYP2D6_11_autodock: -4.98	CYP2D6_11_xscore: -8.9342
CYP2D6_12_autodock: -5.64	CYP2D6_12_xscore: -8.6614
CYP2D6_13_autodock: -5.66	CYP2D6_13_xscore: -8.866
CYP2D6_14_autodock: -4.95	CYP2D6_14_xscore: -8.78416
CYP2D6_15_autodock: -5.34	CYP2D6_15_xscore: -8.7978
CYP2D6_16_autodock: -5.47	CYP2D6_16_xscore: -8.44316
CYP2D6_17_autodock: -4.77	CYP2D6_17_xscore: -8.74324
CYP2D6_18_autodock: -5.56	CYP2D6_18_xscore: -8.74324
CYP2D6_19_autodock: -6.76	CYP2D6_19_xscore: -8.41588
CYP2D6_20_autodock: -5.69	CYP2D6_20_xscore: -8.60684

Ki or IC50 = 0.52

Compound: 6-methoxyquinoline

FormalCharge: 0 Num_PositiveAtoms: 0
Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 2
Num_H_Donors: 0 Molecular_Weight: 159.18455
ALogP: 1.999 Num_Rotatable_Bonds: 1
CYP2D6_1_autodock: -5.98 CYP2D6_1_xscore: -7.13372

CYP2D6_2_autodock: -6.43	CYP2D6_2_xscore: -7.06552
CYP2D6_3_autodock: -6.24	CYP2D6_3_xscore: -6.87456
CYP2D6_4_autodock: -6.09	CYP2D6_4_xscore: -6.82
CYP2D6_5_autodock: -5.76	CYP2D6_5_xscore: -6.86092
CYP2D6_6_autodock: -5.84	CYP2D6_6_xscore: -7.24284
CYP2D6_7_autodock: -6.24	CYP2D6_7_xscore: -6.97004
CYP2D6_8_autodock: -6.39	CYP2D6_8_xscore: -6.69724
CYP2D6_9_autodock: -6.22	CYP2D6_9_xscore: -6.83364
CYP2D6_10_autodock: -5.99	CYP2D6_10_xscore: -6.5472
CYP2D6_11_autodock: -6.58	CYP2D6_11_xscore: -6.87456
CYP2D6_12_autodock: -6.76	CYP2D6_12_xscore: -6.92912
CYP2D6_13_autodock: -6.05	CYP2D6_13_xscore: -6.2744
CYP2D6_14_autodock: -6.09	CYP2D6_14_xscore: -6.8882
CYP2D6_15_autodock: -6.61	CYP2D6_15_xscore: -6.79272
CYP2D6_16_autodock: -6.63	CYP2D6_16_xscore: -6.98368
CYP2D6_17_autodock: -6.10	CYP2D6_17_xscore: -6.8882
CYP2D6_18_autodock: -6.35	CYP2D6_18_xscore: -6.90184
CYP2D6_19_autodock: -6.41	CYP2D6_19_xscore: -6.64268
CYP2D6_20_autodock: -6.20	CYP2D6_20_xscore: -6.62904

Ki or IC50 = 1000

Compound: 9-epiquinidine

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1

Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 3

Num_H_Donors: 2 Molecular_Weight: 325.4247

ALogP: 1.173 Num_Rotatable_Bonds: 5

CYP2D6_1_autodock: -4.59	CYP2D6_1_xscore: -8.48408
CYP2D6_2_autodock: -4.63	CYP2D6_2_xscore: -8.37496
CYP2D6_3_autodock: -5.76	CYP2D6_3_xscore: -8.71596
CYP2D6_4_autodock: -5.50	CYP2D6_4_xscore: -8.29312
CYP2D6_5_autodock: -3.38	CYP2D6_5_xscore: -8.33404
CYP2D6_6_autodock: -5.48	CYP2D6_6_xscore: -7.88392
CYP2D6_7_autodock: -5.56	CYP2D6_7_xscore: -8.02032
CYP2D6_8_autodock: -4.78	CYP2D6_8_xscore: -7.9794
CYP2D6_9_autodock: -5.91	CYP2D6_9_xscore: -8.07488
CYP2D6_10_autodock: -6.26	CYP2D6_10_xscore: -8.08852
CYP2D6_11_autodock: -5.35	CYP2D6_11_xscore: -8.67504
CYP2D6_12_autodock: -4.85	CYP2D6_12_xscore: -8.4568
CYP2D6_13_autodock: -5.08	CYP2D6_13_xscore: -8.48408
CYP2D6_14_autodock: -5.06	CYP2D6_14_xscore: -8.37496
CYP2D6_15_autodock: -4.61	CYP2D6_15_xscore: -8.29312
CYP2D6_16_autodock: -5.04	CYP2D6_16_xscore: -8.34768
CYP2D6_17_autodock: -4.52	CYP2D6_17_xscore: -8.44316
CYP2D6_18_autodock: -6.41	CYP2D6_18_xscore: -8.36132
CYP2D6_19_autodock: -6.15	CYP2D6_19_xscore: -8.17036
CYP2D6_20_autodock: -4.82	CYP2D6_20_xscore: -8.4568

Ki or IC50 = 15.0

Compound: 9-epiquinine

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1

Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 3

Num_H_Donors: 2 Molecular_Weight: 325.4247

ALogP: 1.173 Num_Rotatable_Bonds: 5

CYP2D6_1_autodock: -5.23	CYP2D6_1_xscore: -8.40224
CYP2D6_2_autodock: -5.16	CYP2D6_2_xscore: -8.30676
CYP2D6_3_autodock: -6.11	CYP2D6_3_xscore: -8.63412
CYP2D6_4_autodock: -6.07	CYP2D6_4_xscore: -8.29312
CYP2D6_5_autodock: -4.41	CYP2D6_5_xscore: -8.63412
CYP2D6_6_autodock: -4.82	CYP2D6_6_xscore: -8.06124
CYP2D6_7_autodock: -5.14	CYP2D6_7_xscore: -8.6614
CYP2D6_8_autodock: -5.03	CYP2D6_8_xscore: -8.49772
CYP2D6_9_autodock: -6.16	CYP2D6_9_xscore: -8.29312
CYP2D6_10_autodock: -6.17	CYP2D6_10_xscore: -8.14308
CYP2D6_11_autodock: -4.49	CYP2D6_11_xscore: -8.56592
CYP2D6_12_autodock: -4.99	CYP2D6_12_xscore: -8.49772
CYP2D6_13_autodock: -5.54	CYP2D6_13_xscore: -8.49772
CYP2D6_14_autodock: -5.63	CYP2D6_14_xscore: -8.49772
CYP2D6_15_autodock: -4.20	CYP2D6_15_xscore: -8.3204
CYP2D6_16_autodock: -5.11	CYP2D6_16_xscore: -8.10216
CYP2D6_17_autodock: -4.76	CYP2D6_17_xscore: -8.6614
CYP2D6_18_autodock: -4.58	CYP2D6_18_xscore: -8.36132
CYP2D6_19_autodock: -7.22	CYP2D6_19_xscore: -8.36132
CYP2D6_20_autodock: -5.91	CYP2D6_20_xscore: -8.48408

Ki or IC50 = 21.0

Compound: ajmalicine

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1

Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 3

Num_H_Donors: 2 Molecular_Weight: 353.4348

ALogP: 1.183 Num_Rotatable_Bonds: 2

CYP2D6_1_autodock: -11.68	CYP2D6_1_xscore: -8.42952
CYP2D6_2_autodock: -10.81	CYP2D6_2_xscore: -8.42952
CYP2D6_3_autodock: -8.49	CYP2D6_3_xscore: -8.34768
CYP2D6_4_autodock: -10.82	CYP2D6_4_xscore: -8.56592
CYP2D6_5_autodock: -6.43	CYP2D6_5_xscore: -7.96576
CYP2D6_6_autodock: -10.08	CYP2D6_6_xscore: -7.9112
CYP2D6_7_autodock: -9.70	CYP2D6_7_xscore: -8.7296
CYP2D6_8_autodock: -8.94	CYP2D6_8_xscore: -8.3886
CYP2D6_9_autodock: -9.94	CYP2D6_9_xscore: -8.12944
CYP2D6_10_autodock: -10.37	CYP2D6_10_xscore: -8.55228
CYP2D6_11_autodock: -8.62	CYP2D6_11_xscore: -8.33404
CYP2D6_12_autodock: -10.53	CYP2D6_12_xscore: -8.74324

CYP2D6_13_autodock: -7.52	CYP2D6_13_xscore: -8.14308
CYP2D6_14_autodock: -10.55	CYP2D6_14_xscore: -8.82508
CYP2D6_15_autodock: -10.28	CYP2D6_15_xscore: -8.56592
CYP2D6_16_autodock: -11.86	CYP2D6_16_xscore: -8.82508
CYP2D6_17_autodock: -8.89	CYP2D6_17_xscore: -8.53864
CYP2D6_18_autodock: -11.01	CYP2D6_18_xscore: -8.41588
CYP2D6_19_autodock: -9.49	CYP2D6_19_xscore: -8.525
CYP2D6_20_autodock: -6.93	CYP2D6_20_xscore: -8.19764

Ki or IC50 = 0.0046

Compound: beta-yohimbine

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1
Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 3
Num_H_Donors: 3 Molecular_Weight: 355.45068
ALogP: 1.261 Num_Rotatable_Bonds: 3

CYP2D6_1_autodock: -11.53	CYP2D6_1_xscore: -8.49772
CYP2D6_2_autodock: -10.24	CYP2D6_2_xscore: -8.34768
CYP2D6_3_autodock: -12.03	CYP2D6_3_xscore: -8.64776
CYP2D6_4_autodock: -11.20	CYP2D6_4_xscore: -8.47044
CYP2D6_5_autodock: -8.52	CYP2D6_5_xscore: -8.94784
CYP2D6_6_autodock: -11.02	CYP2D6_6_xscore: -8.184
CYP2D6_7_autodock: -7.91	CYP2D6_7_xscore: -8.41588
CYP2D6_8_autodock: -9.69	CYP2D6_8_xscore: -8.33404
CYP2D6_9_autodock: -11.06	CYP2D6_9_xscore: -8.29312
CYP2D6_10_autodock: -11.22	CYP2D6_10_xscore: -8.55228
CYP2D6_11_autodock: -8.92	CYP2D6_11_xscore: -8.75688
CYP2D6_12_autodock: -10.13	CYP2D6_12_xscore: -8.525
CYP2D6_13_autodock: -11.23	CYP2D6_13_xscore: -8.42952
CYP2D6_14_autodock: -9.71	CYP2D6_14_xscore: -8.23856
CYP2D6_15_autodock: -10.35	CYP2D6_15_xscore: -8.71596
CYP2D6_16_autodock: -10.29	CYP2D6_16_xscore: -8.34768
CYP2D6_17_autodock: -9.91	CYP2D6_17_xscore: -8.3886
CYP2D6_18_autodock: -9.46	CYP2D6_18_xscore: -8.23856
CYP2D6_19_autodock: -11.85	CYP2D6_19_xscore: -8.44316
CYP2D6_20_autodock: -5.70	CYP2D6_20_xscore: -8.1158

Ki or IC50 = 0.031

Compound: cathenamine

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1
Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 3
Num_H_Donors: 1 Molecular_Weight: 351.41892
ALogP: 2.671 Num_Rotatable_Bonds: 2

CYP2D6_1_autodock: -11.29	CYP2D6_1_xscore: -8.49772
CYP2D6_2_autodock: -10.17	CYP2D6_2_xscore: -8.23856
CYP2D6_3_autodock: -9.75	CYP2D6_3_xscore: -8.23856
CYP2D6_4_autodock: -11.15	CYP2D6_4_xscore: -8.63412

CYP2D6_5_autodock: -9.31	CYP2D6_5_xscore: -8.866
CYP2D6_6_autodock: -9.98	CYP2D6_6_xscore: -8.33404
CYP2D6_7_autodock: -10.33	CYP2D6_7_xscore: -8.63412
CYP2D6_8_autodock: -5.65	CYP2D6_8_xscore: -8.07488
CYP2D6_9_autodock: -11.25	CYP2D6_9_xscore: -8.23856
CYP2D6_10_autodock: -10.67	CYP2D6_10_xscore: -8.42952
CYP2D6_11_autodock: -8.90	CYP2D6_11_xscore: -8.75688
CYP2D6_12_autodock: -10.22	CYP2D6_12_xscore: -8.7296
CYP2D6_13_autodock: -10.42	CYP2D6_13_xscore: -8.37496
CYP2D6_14_autodock: -10.40	CYP2D6_14_xscore: -8.71596
CYP2D6_15_autodock: -9.80	CYP2D6_15_xscore: -8.36132
CYP2D6_16_autodock: -10.20	CYP2D6_16_xscore: -8.64776
CYP2D6_17_autodock: -5.02	CYP2D6_17_xscore: -8.12944
CYP2D6_18_autodock: -10.64	CYP2D6_18_xscore: -8.40224
CYP2D6_19_autodock: -10.31	CYP2D6_19_xscore: -8.27948
CYP2D6_20_autodock: -9.28	CYP2D6_20_xscore: -8.33404

Ki or IC50 = 3.2

Compound: cinchonidine

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1

Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 2

Num_H_Donors: 2 Molecular_Weight: 295.39872

ALogP: 1.189 Num_Rotatable_Bonds: 4

CYP2D6_1_autodock: -5.79	CYP2D6_1_xscore: -8.34768
CYP2D6_2_autodock: -5.85	CYP2D6_2_xscore: -8.34768
CYP2D6_3_autodock: -6.33	CYP2D6_3_xscore: -8.55228
CYP2D6_4_autodock: -6.08	CYP2D6_4_xscore: -8.47044
CYP2D6_5_autodock: -3.54	CYP2D6_5_xscore: -8.67504
CYP2D6_6_autodock: -5.84	CYP2D6_6_xscore: -8.03396
CYP2D6_7_autodock: -5.15	CYP2D6_7_xscore: -8.44316
CYP2D6_8_autodock: -7.09	CYP2D6_8_xscore: -8.47044
CYP2D6_9_autodock: -6.11	CYP2D6_9_xscore: -8.27948
CYP2D6_10_autodock: -6.53	CYP2D6_10_xscore: -8.19764
CYP2D6_11_autodock: -4.55	CYP2D6_11_xscore: -8.23856
CYP2D6_12_autodock: -6.38	CYP2D6_12_xscore: -8.30676
CYP2D6_13_autodock: -6.38	CYP2D6_13_xscore: -8.48408
CYP2D6_14_autodock: -6.83	CYP2D6_14_xscore: -8.44316
CYP2D6_15_autodock: -5.23	CYP2D6_15_xscore: -8.51136
CYP2D6_16_autodock: -5.44	CYP2D6_16_xscore: -8.12944
CYP2D6_17_autodock: -4.95	CYP2D6_17_xscore: -8.75688
CYP2D6_18_autodock: -6.07	CYP2D6_18_xscore: -8.27948
CYP2D6_19_autodock: -7.45	CYP2D6_19_xscore: -8.4568
CYP2D6_20_autodock: -8.06	CYP2D6_20_xscore: -8.37496

Ki or IC50 = 7.5

Compound: cinchonine

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1
Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 2
Num_H_Donors: 2 Molecular_Weight: 295.39872
ALogP: 1.189 Num_Rotatable_Bonds: 4

CYP2D6_1_autodock: -4.91	CYP2D6_1_xscore: -8.49772
CYP2D6_2_autodock: -4.46	CYP2D6_2_xscore: -8.525
CYP2D6_3_autodock: -6.58	CYP2D6_3_xscore: -8.57956
CYP2D6_4_autodock: -5.75	CYP2D6_4_xscore: -8.55228
CYP2D6_5_autodock: -4.07	CYP2D6_5_xscore: -8.49772
CYP2D6_6_autodock: -5.43	CYP2D6_6_xscore: -7.96576
CYP2D6_7_autodock: -4.86	CYP2D6_7_xscore: -8.55228
CYP2D6_8_autodock: -4.85	CYP2D6_8_xscore: -8.49772
CYP2D6_9_autodock: -5.91	CYP2D6_9_xscore: -8.22492
CYP2D6_10_autodock: -5.63	CYP2D6_10_xscore: -8.03396
CYP2D6_11_autodock: -4.63	CYP2D6_11_xscore: -8.68868
CYP2D6_12_autodock: -4.81	CYP2D6_12_xscore: -8.3204
CYP2D6_13_autodock: -5.13	CYP2D6_13_xscore: -8.70232
CYP2D6_14_autodock: -5.60	CYP2D6_14_xscore: -8.3886
CYP2D6_15_autodock: -3.94	CYP2D6_15_xscore: -8.57956
CYP2D6_16_autodock: -5.46	CYP2D6_16_xscore: -8.21128
CYP2D6_17_autodock: -4.17	CYP2D6_17_xscore: -8.63412
CYP2D6_18_autodock: -5.69	CYP2D6_18_xscore: -8.525
CYP2D6_19_autodock: -6.22	CYP2D6_19_xscore: -8.26584
CYP2D6_20_autodock: -5.68	CYP2D6_20_xscore: -8.36132

Ki or IC50 = 3.5

Compound: clozapine

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1
Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 3
Num_H_Donors: 2 Molecular_Weight: 327.8312
ALogP: 1.862 Num_Rotatable_Bonds: 1

CYP2D6_1_autodock: -9.49	CYP2D6_1_xscore: -8.70232
CYP2D6_2_autodock: -8.54	CYP2D6_2_xscore: -8.5932
CYP2D6_3_autodock: -9.02	CYP2D6_3_xscore: -8.44316
CYP2D6_4_autodock: -9.56	CYP2D6_4_xscore: -8.47044
CYP2D6_5_autodock: -9.71	CYP2D6_5_xscore: -8.75688
CYP2D6_6_autodock: -10.11	CYP2D6_6_xscore: -8.33404
CYP2D6_7_autodock: -9.59	CYP2D6_7_xscore: -8.63412
CYP2D6_8_autodock: -8.33	CYP2D6_8_xscore: -8.26584
CYP2D6_9_autodock: -11.44	CYP2D6_9_xscore: -8.26584
CYP2D6_10_autodock: -10.12	CYP2D6_10_xscore: -8.17036
CYP2D6_11_autodock: -9.88	CYP2D6_11_xscore: -8.62048
CYP2D6_12_autodock: -9.49	CYP2D6_12_xscore: -8.7296
CYP2D6_13_autodock: -8.52	CYP2D6_13_xscore: -8.525
CYP2D6_14_autodock: -9.50	CYP2D6_14_xscore: -8.74324
CYP2D6_15_autodock: -8.91	CYP2D6_15_xscore: -8.42952

CYP2D6_16_autodock: -9.66 CYP2D6_16_xscore: -8.41588
CYP2D6_17_autodock: -9.93 CYP2D6_17_xscore: -8.56592
CYP2D6_18_autodock: -7.74 CYP2D6_18_xscore: -8.26584
CYP2D6_19_autodock: -10.59 CYP2D6_19_xscore: -8.10216
CYP2D6_20_autodock: -9.25 CYP2D6_20_xscore: -8.64776
Ki or IC50 = 19.0

Compound: corynanthine

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1

Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 3

Num_H_Donors: 3 Molecular_Weight: 355.45068

ALogP: 1.261 Num_Rotatable_Bonds: 3

CYP2D6_1_autodock: -10.91 CYP2D6_1_xscore: -8.47044
CYP2D6_2_autodock: -9.54 CYP2D6_2_xscore: -8.85236
CYP2D6_3_autodock: -6.53 CYP2D6_3_xscore: -8.42952
CYP2D6_4_autodock: -10.97 CYP2D6_4_xscore: -8.57956
CYP2D6_5_autodock: -1.68 CYP2D6_5_xscore: -8.08852
CYP2D6_6_autodock: -11.07 CYP2D6_6_xscore: -8.33404
CYP2D6_7_autodock: -8.93 CYP2D6_7_xscore: -8.4568
CYP2D6_8_autodock: -6.71 CYP2D6_8_xscore: -8.47044
CYP2D6_9_autodock: -10.11 CYP2D6_9_xscore: -7.99304
CYP2D6_10_autodock: -10.78 CYP2D6_10_xscore: -8.40224
CYP2D6_11_autodock: -7.84 CYP2D6_11_xscore: -8.56592
CYP2D6_12_autodock: -9.60 CYP2D6_12_xscore: -8.08852
CYP2D6_13_autodock: -10.32 CYP2D6_13_xscore: -8.37496
CYP2D6_14_autodock: -10.09 CYP2D6_14_xscore: -8.98876
CYP2D6_15_autodock: -9.73 CYP2D6_15_xscore: -8.27948
CYP2D6_16_autodock: -12.39 CYP2D6_16_xscore: -8.47044
CYP2D6_17_autodock: -8.57 CYP2D6_17_xscore: -8.02032
CYP2D6_18_autodock: -10.79 CYP2D6_18_xscore: -8.51136
CYP2D6_19_autodock: -9.83 CYP2D6_19_xscore: -8.30676
CYP2D6_20_autodock: -5.92 CYP2D6_20_xscore: -7.92484
Ki or IC50 = 0.08

Compound: ekins-quinidine

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1

Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 3

Num_H_Donors: 2 Molecular_Weight: 325.4247

ALogP: 1.173 Num_Rotatable_Bonds: 5

CYP2D6_1_autodock: -5.40 CYP2D6_1_xscore: -8.23856
CYP2D6_2_autodock: -5.22 CYP2D6_2_xscore: -8.34768
CYP2D6_3_autodock: -5.71 CYP2D6_3_xscore: -8.60684
CYP2D6_4_autodock: -6.85 CYP2D6_4_xscore: -8.51136
CYP2D6_5_autodock: -3.89 CYP2D6_5_xscore: -8.48408
CYP2D6_6_autodock: -5.99 CYP2D6_6_xscore: -7.82936
CYP2D6_7_autodock: -4.89 CYP2D6_7_xscore: -8.525

CYP2D6_8_autodock: -3.87	CYP2D6_8_xscore: -8.1158
CYP2D6_9_autodock: -6.10	CYP2D6_9_xscore: -8.19764
CYP2D6_10_autodock: -5.41	CYP2D6_10_xscore: -8.19764
CYP2D6_11_autodock: -5.03	CYP2D6_11_xscore: -8.70232
CYP2D6_12_autodock: -6.25	CYP2D6_12_xscore: -8.48408
CYP2D6_13_autodock: -6.14	CYP2D6_13_xscore: -8.44316
CYP2D6_14_autodock: -5.61	CYP2D6_14_xscore: -8.48408
CYP2D6_15_autodock: -4.34	CYP2D6_15_xscore: -8.4568
CYP2D6_16_autodock: -5.57	CYP2D6_16_xscore: -8.10216
CYP2D6_17_autodock: -5.02	CYP2D6_17_xscore: -8.4568
CYP2D6_18_autodock: -6.15	CYP2D6_18_xscore: -8.17036
CYP2D6_19_autodock: -6.77	CYP2D6_19_xscore: -8.26584
CYP2D6_20_autodock: -5.25	CYP2D6_20_xscore: -8.41588

Ki or IC50 = 0.03

Compound: fluoxetine-r

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1
Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 1
Num_H_Donors: 1 Molecular_Weight: 310.33406
ALogP: 2.802 Num_Rotatable_Bonds: 7

CYP2D6_1_autodock: -5.88	CYP2D6_1_xscore: -8.26584
CYP2D6_2_autodock: -5.21	CYP2D6_2_xscore: -8.22492
CYP2D6_3_autodock: -5.66	CYP2D6_3_xscore: -8.34768
CYP2D6_4_autodock: -5.69	CYP2D6_4_xscore: -8.17036
CYP2D6_5_autodock: -6.20	CYP2D6_5_xscore: -8.27948
CYP2D6_6_autodock: -5.88	CYP2D6_6_xscore: -7.7748
CYP2D6_7_autodock: -6.70	CYP2D6_7_xscore: -8.37496
CYP2D6_8_autodock: -4.82	CYP2D6_8_xscore: -8.29312
CYP2D6_9_autodock: -5.97	CYP2D6_9_xscore: -7.89756
CYP2D6_10_autodock: -6.33	CYP2D6_10_xscore: -8.03396
CYP2D6_11_autodock: -5.16	CYP2D6_11_xscore: -8.184
CYP2D6_12_autodock: -5.82	CYP2D6_12_xscore: -8.2522
CYP2D6_13_autodock: -6.47	CYP2D6_13_xscore: -8.06124
CYP2D6_14_autodock: -5.60	CYP2D6_14_xscore: -8.3886
CYP2D6_15_autodock: -4.78	CYP2D6_15_xscore: -8.22492
CYP2D6_16_autodock: -6.06	CYP2D6_16_xscore: -8.10216
CYP2D6_17_autodock: -6.15	CYP2D6_17_xscore: -8.14308
CYP2D6_18_autodock: -5.39	CYP2D6_18_xscore: -8.12944
CYP2D6_19_autodock: -6.50	CYP2D6_19_xscore: -8.07488
CYP2D6_20_autodock: -5.62	CYP2D6_20_xscore: -8.12944

Ki or IC50 = 1.38

Compound: fluoxetine-s

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1
Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 1
Num_H_Donors: 1 Molecular_Weight: 310.33406

ALogP: 2.802 Num_Rotatable_Bonds: 7

CYP2D6_1_autodock: -5.20	CYP2D6_1_xscore: -8.26584
CYP2D6_2_autodock: -4.75	CYP2D6_2_xscore: -8.30676
CYP2D6_3_autodock: -6.03	CYP2D6_3_xscore: -8.08852
CYP2D6_4_autodock: -6.17	CYP2D6_4_xscore: -8.525
CYP2D6_5_autodock: -5.18	CYP2D6_5_xscore: -8.184
CYP2D6_6_autodock: -5.79	CYP2D6_6_xscore: -7.69296
CYP2D6_7_autodock: -6.12	CYP2D6_7_xscore: -7.843
CYP2D6_8_autodock: -4.35	CYP2D6_8_xscore: -8.23856
CYP2D6_9_autodock: -6.96	CYP2D6_9_xscore: -8.07488
CYP2D6_10_autodock: -6.29	CYP2D6_10_xscore: -7.9794
CYP2D6_11_autodock: -4.53	CYP2D6_11_xscore: -8.19764
CYP2D6_12_autodock: -5.25	CYP2D6_12_xscore: -8.12944
CYP2D6_13_autodock: -5.42	CYP2D6_13_xscore: -8.40224
CYP2D6_14_autodock: -5.66	CYP2D6_14_xscore: -8.00668
CYP2D6_15_autodock: -4.97	CYP2D6_15_xscore: -8.1158
CYP2D6_16_autodock: -4.73	CYP2D6_16_xscore: -8.12944
CYP2D6_17_autodock: -6.68	CYP2D6_17_xscore: -8.19764
CYP2D6_18_autodock: -5.09	CYP2D6_18_xscore: -8.40224
CYP2D6_19_autodock: -6.69	CYP2D6_19_xscore: -7.843
CYP2D6_20_autodock: -6.61	CYP2D6_20_xscore: -8.4568

Ki or IC50 = 0.22

Compound: harmalol

FormalCharge: 0 Num_PositiveAtoms: 0

Num_AromaticRings: 3 Num_H_Acceptors: 2

Num_H_Donors: 2 Molecular_Weight: 198.22059

ALogP: 2.213 Num_Rotatable_Bonds: 1

CYP2D6_1_autodock: -6.50	CYP2D6_1_xscore: -7.62476
CYP2D6_2_autodock: -6.40	CYP2D6_2_xscore: -7.33832
CYP2D6_3_autodock: -7.66	CYP2D6_3_xscore: -7.46108
CYP2D6_4_autodock: -6.79	CYP2D6_4_xscore: -7.40652
CYP2D6_5_autodock: -6.25	CYP2D6_5_xscore: -7.52928
CYP2D6_6_autodock: -6.97	CYP2D6_6_xscore: -7.72024
CYP2D6_7_autodock: -7.82	CYP2D6_7_xscore: -7.54292
CYP2D6_8_autodock: -7.65	CYP2D6_8_xscore: -7.39288
CYP2D6_9_autodock: -7.93	CYP2D6_9_xscore: -7.20192
CYP2D6_10_autodock: -7.23	CYP2D6_10_xscore: -7.33832
CYP2D6_11_autodock: -7.94	CYP2D6_11_xscore: -7.66568
CYP2D6_12_autodock: -7.26	CYP2D6_12_xscore: -7.32468
CYP2D6_13_autodock: -7.24	CYP2D6_13_xscore: -7.4338
CYP2D6_14_autodock: -7.20	CYP2D6_14_xscore: -7.46108
CYP2D6_15_autodock: -7.75	CYP2D6_15_xscore: -7.28376
CYP2D6_16_autodock: -6.92	CYP2D6_16_xscore: -7.37924
CYP2D6_17_autodock: -6.97	CYP2D6_17_xscore: -7.20192
CYP2D6_18_autodock: -7.58	CYP2D6_18_xscore: -7.48836

CYP2D6_19_autodock: -8.17 CYP2D6_19_xscore: -7.3656
CYP2D6_20_autodock: -6.34 CYP2D6_20_xscore: -7.27012
Ki or IC50 = 65.0

Compound: harman

FormalCharge: 0 Num_PositiveAtoms: 0
Num_AromaticRings: 3 Num_H_Acceptors: 1
Num_H_Donors: 1 Molecular_Weight: 182.22119
ALogP: 2.455 Num_Rotatable_Bonds: 0

CYP2D6_1_autodock: -6.67	CYP2D6_1_xscore: -7.54292
CYP2D6_2_autodock: -7.53	CYP2D6_2_xscore: -7.67932
CYP2D6_3_autodock: -7.40	CYP2D6_3_xscore: -7.5702
CYP2D6_4_autodock: -7.04	CYP2D6_4_xscore: -7.32468
CYP2D6_5_autodock: -6.73	CYP2D6_5_xscore: -7.78844
CYP2D6_6_autodock: -7.14	CYP2D6_6_xscore: -7.7748
CYP2D6_7_autodock: -7.40	CYP2D6_7_xscore: -7.59748
CYP2D6_8_autodock: -7.91	CYP2D6_8_xscore: -7.37924
CYP2D6_9_autodock: -7.21	CYP2D6_9_xscore: -7.2292
CYP2D6_10_autodock: -6.74	CYP2D6_10_xscore: -7.28376
CYP2D6_11_autodock: -7.72	CYP2D6_11_xscore: -7.65204
CYP2D6_12_autodock: -7.52	CYP2D6_12_xscore: -7.2974
CYP2D6_13_autodock: -7.37	CYP2D6_13_xscore: -7.54292
CYP2D6_14_autodock: -6.81	CYP2D6_14_xscore: -7.40652
CYP2D6_15_autodock: -7.83	CYP2D6_15_xscore: -7.44744
CYP2D6_16_autodock: -6.46	CYP2D6_16_xscore: -7.62476
CYP2D6_17_autodock: -6.81	CYP2D6_17_xscore: -7.54292
CYP2D6_18_autodock: -7.84	CYP2D6_18_xscore: -7.66568
CYP2D6_19_autodock: -7.72	CYP2D6_19_xscore: -7.67932
CYP2D6_20_autodock: -6.53	CYP2D6_20_xscore: -7.31104

Ki or IC50 = 86.0

Compound: harmine

FormalCharge: 0 Num_PositiveAtoms: 0
Num_AromaticRings: 3 Num_H_Acceptors: 2
Num_H_Donors: 1 Molecular_Weight: 212.24717
ALogP: 2.438 Num_Rotatable_Bonds: 1

CYP2D6_1_autodock: -6.36	CYP2D6_1_xscore: -7.37924
CYP2D6_2_autodock: -6.72	CYP2D6_2_xscore: -7.12008
CYP2D6_3_autodock: -6.88	CYP2D6_3_xscore: -7.47472
CYP2D6_4_autodock: -6.78	CYP2D6_4_xscore: -7.35196
CYP2D6_5_autodock: -5.94	CYP2D6_5_xscore: -7.58384
CYP2D6_6_autodock: -7.11	CYP2D6_6_xscore: -7.7066
CYP2D6_7_autodock: -7.13	CYP2D6_7_xscore: -7.35196
CYP2D6_8_autodock: -6.69	CYP2D6_8_xscore: -7.33832
CYP2D6_9_autodock: -6.97	CYP2D6_9_xscore: -7.14736
CYP2D6_10_autodock: -6.98	CYP2D6_10_xscore: -7.27012

CYP2D6_11_autodock: -8.23	CYP2D6_11_xscore: -7.59748
CYP2D6_12_autodock: -7.89	CYP2D6_12_xscore: -7.48836
CYP2D6_13_autodock: -7.08	CYP2D6_13_xscore: -7.35196
CYP2D6_14_autodock: -6.37	CYP2D6_14_xscore: -6.99732
CYP2D6_15_autodock: -8.04	CYP2D6_15_xscore: -7.27012
CYP2D6_16_autodock: -6.67	CYP2D6_16_xscore: -7.58384
CYP2D6_17_autodock: -6.83	CYP2D6_17_xscore: -7.5702
CYP2D6_18_autodock: -6.70	CYP2D6_18_xscore: -7.21556
CYP2D6_19_autodock: -7.80	CYP2D6_19_xscore: -7.39288
CYP2D6_20_autodock: -6.49	CYP2D6_20_xscore: -7.35196

Ki or IC50 = 50.0

Compound: ly139603

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1
Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 1
Num_H_Donors: 1 Molecular_Weight: 256.36267
ALogP: 2.346 Num_Rotatable_Bonds: 6

CYP2D6_1_autodock: -7.60	CYP2D6_1_xscore: -8.27948
CYP2D6_2_autodock: -7.42	CYP2D6_2_xscore: -8.19764
CYP2D6_3_autodock: -9.20	CYP2D6_3_xscore: -8.184
CYP2D6_4_autodock: -7.65	CYP2D6_4_xscore: -8.184
CYP2D6_5_autodock: -7.71	CYP2D6_5_xscore: -8.47044
CYP2D6_6_autodock: -7.83	CYP2D6_6_xscore: -7.9112
CYP2D6_7_autodock: -8.23	CYP2D6_7_xscore: -8.23856
CYP2D6_8_autodock: -7.86	CYP2D6_8_xscore: -8.27948
CYP2D6_9_autodock: -9.14	CYP2D6_9_xscore: -7.52928
CYP2D6_10_autodock: -8.27	CYP2D6_10_xscore: -7.92484
CYP2D6_11_autodock: -6.47	CYP2D6_11_xscore: -8.21128
CYP2D6_12_autodock: -7.88	CYP2D6_12_xscore: -8.29312
CYP2D6_13_autodock: -7.53	CYP2D6_13_xscore: -7.99304
CYP2D6_14_autodock: -7.48	CYP2D6_14_xscore: -8.14308
CYP2D6_15_autodock: -7.08	CYP2D6_15_xscore: -7.96576
CYP2D6_16_autodock: -7.73	CYP2D6_16_xscore: -8.10216
CYP2D6_17_autodock: -8.46	CYP2D6_17_xscore: -8.41588
CYP2D6_18_autodock: -7.34	CYP2D6_18_xscore: -8.22492
CYP2D6_19_autodock: -10.43	CYP2D6_19_xscore: -8.06124
CYP2D6_20_autodock: -7.53	CYP2D6_20_xscore: -8.34768

Ki or IC50 = 3.6

Compound: ly156735-r

FormalCharge: 0 Num_PositiveAtoms: 0
Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 2
Num_H_Donors: 2 Molecular_Weight: 280.74998
ALogP: 2.539 Num_Rotatable_Bonds: 5

CYP2D6_1_autodock: -7.64	CYP2D6_1_xscore: -7.67932
CYP2D6_2_autodock: -7.56	CYP2D6_2_xscore: -7.5702

CYP2D6_3_autodock: -7.99	CYP2D6_3_xscore: -7.59748
CYP2D6_4_autodock: -8.24	CYP2D6_4_xscore: -7.61112
CYP2D6_5_autodock: -7.04	CYP2D6_5_xscore: -7.7748
CYP2D6_6_autodock: -7.74	CYP2D6_6_xscore: -7.03824
CYP2D6_7_autodock: -7.75	CYP2D6_7_xscore: -8.17036
CYP2D6_8_autodock: -9.28	CYP2D6_8_xscore: -7.46108
CYP2D6_9_autodock: -8.19	CYP2D6_9_xscore: -7.37924
CYP2D6_10_autodock: -8.61	CYP2D6_10_xscore: -7.5702
CYP2D6_11_autodock: -7.83	CYP2D6_11_xscore: -7.72024
CYP2D6_12_autodock: -7.54	CYP2D6_12_xscore: -7.85664
CYP2D6_13_autodock: -7.60	CYP2D6_13_xscore: -7.4338
CYP2D6_14_autodock: -7.85	CYP2D6_14_xscore: -7.55656
CYP2D6_15_autodock: -7.27	CYP2D6_15_xscore: -7.55656
CYP2D6_16_autodock: -8.27	CYP2D6_16_xscore: -7.46108
CYP2D6_17_autodock: -9.07	CYP2D6_17_xscore: -7.59748
CYP2D6_18_autodock: -7.96	CYP2D6_18_xscore: -7.78844
CYP2D6_19_autodock: -8.97	CYP2D6_19_xscore: -7.6384
CYP2D6_20_autodock: -8.12	CYP2D6_20_xscore: -7.66568

Ki or IC50 = 334.1

Compound: ly156735-s

FormalCharge: 0 Num_PositiveAtoms: 0

Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 2

Num_H_Donors: 2 Molecular_Weight: 280.74998

ALogP: 2.539 Num_Rotatable_Bonds: 5

CYP2D6_1_autodock: -7.56	CYP2D6_1_xscore: -7.9112
CYP2D6_2_autodock: -8.47	CYP2D6_2_xscore: -7.54292
CYP2D6_3_autodock: -9.48	CYP2D6_3_xscore: -7.7066
CYP2D6_4_autodock: -8.13	CYP2D6_4_xscore: -7.65204
CYP2D6_5_autodock: -7.15	CYP2D6_5_xscore: -7.85664
CYP2D6_6_autodock: -8.22	CYP2D6_6_xscore: -7.10644
CYP2D6_7_autodock: -7.46	CYP2D6_7_xscore: -7.88392
CYP2D6_8_autodock: -8.71	CYP2D6_8_xscore: -7.54292
CYP2D6_9_autodock: -9.05	CYP2D6_9_xscore: -7.33832
CYP2D6_10_autodock: -7.67	CYP2D6_10_xscore: -7.58384
CYP2D6_11_autodock: -7.57	CYP2D6_11_xscore: -7.59748
CYP2D6_12_autodock: -7.56	CYP2D6_12_xscore: -7.66568
CYP2D6_13_autodock: -7.18	CYP2D6_13_xscore: -7.66568
CYP2D6_14_autodock: -8.27	CYP2D6_14_xscore: -7.62476
CYP2D6_15_autodock: -7.09	CYP2D6_15_xscore: -7.62476
CYP2D6_16_autodock: -8.22	CYP2D6_16_xscore: -7.62476
CYP2D6_17_autodock: -8.87	CYP2D6_17_xscore: -7.66568
CYP2D6_18_autodock: -7.37	CYP2D6_18_xscore: -7.7066
CYP2D6_19_autodock: -9.48	CYP2D6_19_xscore: -7.78844
CYP2D6_20_autodock: -7.64	CYP2D6_20_xscore: -7.69296

Ki or IC50 = 334.1

Compound: ly170053

FormalCharge: 2 Num_PositiveAtoms: 2

Num_AromaticRings: 3 Num_H_Acceptors: 2

Num_H_Donors: 2 Molecular_Weight: 314.44838

ALogP: 1.076 Num_Rotatable_Bonds: 1

CYP2D6_1_autodock: -9.37	CYP2D6_1_xscore: -8.3886
CYP2D6_2_autodock: -7.90	CYP2D6_2_xscore: -8.19764
CYP2D6_3_autodock: -8.61	CYP2D6_3_xscore: -8.12944
CYP2D6_4_autodock: -9.70	CYP2D6_4_xscore: -8.2522
CYP2D6_5_autodock: -9.60	CYP2D6_5_xscore: -8.42952
CYP2D6_6_autodock: -9.52	CYP2D6_6_xscore: -7.80208
CYP2D6_7_autodock: -9.46	CYP2D6_7_xscore: -8.3204
CYP2D6_8_autodock: -7.49	CYP2D6_8_xscore: -7.62476
CYP2D6_9_autodock: -10.56	CYP2D6_9_xscore: -8.14308
CYP2D6_10_autodock: -10.53	CYP2D6_10_xscore: -8.26584
CYP2D6_11_autodock: -8.65	CYP2D6_11_xscore: -8.02032
CYP2D6_12_autodock: -8.97	CYP2D6_12_xscore: -8.2522
CYP2D6_13_autodock: -7.82	CYP2D6_13_xscore: -8.08852
CYP2D6_14_autodock: -9.05	CYP2D6_14_xscore: -8.26584
CYP2D6_15_autodock: -8.25	CYP2D6_15_xscore: -8.10216
CYP2D6_16_autodock: -8.49	CYP2D6_16_xscore: -7.843
CYP2D6_17_autodock: -9.26	CYP2D6_17_xscore: -8.3886
CYP2D6_18_autodock: -8.47	CYP2D6_18_xscore: -8.14308
CYP2D6_19_autodock: -10.39	CYP2D6_19_xscore: -8.23856
CYP2D6_20_autodock: -9.32	CYP2D6_20_xscore: -8.29312

Ki or IC50 = 89.0

Compound: ly237733

FormalCharge: 0 Num_PositiveAtoms: 0

Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 2

Num_H_Donors: 1 Molecular_Weight: 393.5649

ALogP: 4.674 Num_Rotatable_Bonds: 4

CYP2D6_1_autodock: -10.36	CYP2D6_1_xscore: -9.49344
CYP2D6_2_autodock: -7.02	CYP2D6_2_xscore: -9.22064
CYP2D6_3_autodock: -4.44	CYP2D6_3_xscore: -9.11152
CYP2D6_4_autodock: -11.75	CYP2D6_4_xscore: -9.8208
CYP2D6_5_autodock: -4.45	CYP2D6_5_xscore: -9.16608
CYP2D6_6_autodock: -12.33	CYP2D6_6_xscore: -9.24792
CYP2D6_7_autodock: -6.16	CYP2D6_7_xscore: -9.17972
CYP2D6_8_autodock: -8.24	CYP2D6_8_xscore: -9.22064
CYP2D6_9_autodock: -10.36	CYP2D6_9_xscore: -9.15244
CYP2D6_10_autodock: -11.85	CYP2D6_10_xscore: -9.4798
CYP2D6_11_autodock: -3.75	CYP2D6_11_xscore: -9.09788
CYP2D6_12_autodock: -10.11	CYP2D6_12_xscore: -9.08424
CYP2D6_13_autodock: -10.15	CYP2D6_13_xscore: -9.09788

CYP2D6_14_autodock: -10.83	CYP2D6_14_xscore: -9.4798
CYP2D6_15_autodock: -9.53	CYP2D6_15_xscore: -8.97512
CYP2D6_16_autodock: -9.51	CYP2D6_16_xscore: -9.24792
CYP2D6_17_autodock: -6.94	CYP2D6_17_xscore: -9.39796
CYP2D6_18_autodock: -8.70	CYP2D6_18_xscore: -9.04332
CYP2D6_19_autodock: -10.48	CYP2D6_19_xscore: -9.56164
CYP2D6_20_autodock: -5.87	CYP2D6_20_xscore: -9.12516

Ki or IC50 = 2.1

Compound: ly246708

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1
Num_AromaticRings: 1 Num_H_Acceptors: 3
Num_H_Donors: 1 Molecular_Weight: 282.42486
ALogP: 2.4 Num_Rotatable_Bonds: 7

CYP2D6_1_autodock: -8.43	CYP2D6_1_xscore: -7.72024
CYP2D6_2_autodock: -9.00	CYP2D6_2_xscore: -7.62476
CYP2D6_3_autodock: -9.81	CYP2D6_3_xscore: -7.7066
CYP2D6_4_autodock: -9.26	CYP2D6_4_xscore: -7.80208
CYP2D6_5_autodock: -9.04	CYP2D6_5_xscore: -7.99304
CYP2D6_6_autodock: -9.49	CYP2D6_6_xscore: -7.33832
CYP2D6_7_autodock: -9.96	CYP2D6_7_xscore: -7.3656
CYP2D6_8_autodock: -10.16	CYP2D6_8_xscore: -7.40652
CYP2D6_9_autodock: -9.61	CYP2D6_9_xscore: -7.20192
CYP2D6_10_autodock: -10.02	CYP2D6_10_xscore: -7.48836
CYP2D6_11_autodock: -8.89	CYP2D6_11_xscore: -7.61112
CYP2D6_12_autodock: -8.88	CYP2D6_12_xscore: -7.82936
CYP2D6_13_autodock: -9.58	CYP2D6_13_xscore: -7.33832
CYP2D6_14_autodock: -9.06	CYP2D6_14_xscore: -7.62476
CYP2D6_15_autodock: -8.41	CYP2D6_15_xscore: -7.48836
CYP2D6_16_autodock: -9.28	CYP2D6_16_xscore: -7.7748
CYP2D6_17_autodock: -8.81	CYP2D6_17_xscore: -7.73388
CYP2D6_18_autodock: -10.09	CYP2D6_18_xscore: -7.52928
CYP2D6_19_autodock: -11.57	CYP2D6_19_xscore: -7.3656
CYP2D6_20_autodock: -9.84	CYP2D6_20_xscore: -7.58384

Ki or IC50 = 0.44

Compound: ly248686

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1
Num_AromaticRings: 3 Num_H_Acceptors: 1
Num_H_Donors: 1 Molecular_Weight: 298.4225
ALogP: 2.615 Num_Rotatable_Bonds: 6

CYP2D6_1_autodock: -8.59	CYP2D6_1_xscore: -8.26584
CYP2D6_2_autodock: -7.17	CYP2D6_2_xscore: -8.10216
CYP2D6_3_autodock: -8.64	CYP2D6_3_xscore: -8.42952
CYP2D6_4_autodock: -8.34	CYP2D6_4_xscore: -8.19764
CYP2D6_5_autodock: -8.43	CYP2D6_5_xscore: -8.525

CYP2D6_6_autodock: -8.17	CYP2D6_6_xscore: -7.72024
CYP2D6_7_autodock: -8.80	CYP2D6_7_xscore: -8.44316
CYP2D6_8_autodock: -8.18	CYP2D6_8_xscore: -8.02032
CYP2D6_9_autodock: -9.47	CYP2D6_9_xscore: -7.89756
CYP2D6_10_autodock: -8.66	CYP2D6_10_xscore: -7.99304
CYP2D6_11_autodock: -7.78	CYP2D6_11_xscore: -8.29312
CYP2D6_12_autodock: -8.83	CYP2D6_12_xscore: -8.36132
CYP2D6_13_autodock: -8.06	CYP2D6_13_xscore: -8.41588
CYP2D6_14_autodock: -7.92	CYP2D6_14_xscore: -8.21128
CYP2D6_15_autodock: -7.55	CYP2D6_15_xscore: -8.23856
CYP2D6_16_autodock: -9.26	CYP2D6_16_xscore: -8.10216
CYP2D6_17_autodock: -9.53	CYP2D6_17_xscore: -8.40224
CYP2D6_18_autodock: -8.06	CYP2D6_18_xscore: -8.17036
CYP2D6_19_autodock: -11.30	CYP2D6_19_xscore: -7.87028
CYP2D6_20_autodock: -8.38	CYP2D6_20_xscore: -8.60684

Ki or IC50 = 2.4

Compound: ly294468
FormalCharge: 2 Num_PositiveAtoms: 2
Num_AromaticRings: 1 Num_H_Acceptors: 5
Num_H_Donors: 5 Molecular_Weight: 418.53306
ALogP: -1.27 Num_Rotatable_Bonds: 16

CYP2D6_1_autodock: -8.58	CYP2D6_1_xscore: -8.12944
CYP2D6_2_autodock: -2.11	CYP2D6_2_xscore: -7.82936
CYP2D6_3_autodock: -3.92	CYP2D6_3_xscore: -7.92484
CYP2D6_4_autodock: -7.80	CYP2D6_4_xscore: -8.07488
CYP2D6_5_autodock: -4.26	CYP2D6_5_xscore: -7.9112
CYP2D6_6_autodock: -9.84	CYP2D6_6_xscore: -8.0476
CYP2D6_7_autodock: -5.53	CYP2D6_7_xscore: -7.843
CYP2D6_8_autodock: -5.77	CYP2D6_8_xscore: -7.9794
CYP2D6_9_autodock: -9.59	CYP2D6_9_xscore: -8.1158
CYP2D6_10_autodock: -8.33	CYP2D6_10_xscore: -7.74752
CYP2D6_11_autodock: -7.13	CYP2D6_11_xscore: -7.78844
CYP2D6_12_autodock: -8.63	CYP2D6_12_xscore: -8.07488
CYP2D6_13_autodock: -8.00	CYP2D6_13_xscore: -7.6384
CYP2D6_14_autodock: -8.81	CYP2D6_14_xscore: -8.33404
CYP2D6_15_autodock: -6.68	CYP2D6_15_xscore: -7.82936
CYP2D6_16_autodock: -4.44	CYP2D6_16_xscore: -7.42016
CYP2D6_17_autodock: -6.39	CYP2D6_17_xscore: -7.6384
CYP2D6_18_autodock: -4.66	CYP2D6_18_xscore: -8.06124
CYP2D6_19_autodock: -8.50	CYP2D6_19_xscore: -8.17036
CYP2D6_20_autodock: -2.43	CYP2D6_20_xscore: -8.14308

Ki or IC50 = 529.5

Compound: ly297802
FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1

Num_AromaticRings: 1 Num_H_Acceptors: 3
Num_H_Donors: 1 Molecular_Weight: 284.46388
ALogP: 1.925 Num_Rotatable_Bonds: 5

CYP2D6_1_autodock: -8.97	CYP2D6_1_xscore: -7.72024
CYP2D6_2_autodock: -9.45	CYP2D6_2_xscore: -7.6384
CYP2D6_3_autodock: -9.70	CYP2D6_3_xscore: -7.80208
CYP2D6_4_autodock: -9.39	CYP2D6_4_xscore: -7.99304
CYP2D6_5_autodock: -8.23	CYP2D6_5_xscore: -7.92484
CYP2D6_6_autodock: -9.12	CYP2D6_6_xscore: -7.18828
CYP2D6_7_autodock: -9.54	CYP2D6_7_xscore: -7.73388
CYP2D6_8_autodock: -9.93	CYP2D6_8_xscore: -7.502
CYP2D6_9_autodock: -10.26	CYP2D6_9_xscore: -7.14736
CYP2D6_10_autodock: -9.81	CYP2D6_10_xscore: -7.5702
CYP2D6_11_autodock: -7.92	CYP2D6_11_xscore: -7.81572
CYP2D6_12_autodock: -8.49	CYP2D6_12_xscore: -7.78844
CYP2D6_13_autodock: -8.82	CYP2D6_13_xscore: -7.7066
CYP2D6_14_autodock: -9.01	CYP2D6_14_xscore: -7.65204
CYP2D6_15_autodock: -8.01	CYP2D6_15_xscore: -7.58384
CYP2D6_16_autodock: -8.59	CYP2D6_16_xscore: -7.7066
CYP2D6_17_autodock: -9.85	CYP2D6_17_xscore: -7.47472
CYP2D6_18_autodock: -9.24	CYP2D6_18_xscore: -7.72024
CYP2D6_19_autodock: -10.83	CYP2D6_19_xscore: -7.48836
CYP2D6_20_autodock: -9.11	CYP2D6_20_xscore: -7.69296

Ki or IC50 = 2.55

Compound: ly303870

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1
Num_AromaticRings: 3 Num_H_Acceptors: 4
Num_H_Donors: 3 Molecular_Weight: 560.75003
ALogP: 2.039 Num_Rotatable_Bonds: 13

CYP2D6_1_autodock: +13.07	CYP2D6_1_xscore: -8.75688
CYP2D6_2_autodock: +40.78	CYP2D6_2_xscore: -8.525
CYP2D6_3_autodock: +54.41	CYP2D6_3_xscore: -8.14308
CYP2D6_4_autodock: +1.20	CYP2D6_4_xscore: -9.38432
CYP2D6_5_autodock: +35.86	CYP2D6_5_xscore: -8.68868
CYP2D6_6_autodock: +1.63	CYP2D6_6_xscore: -9.04332
CYP2D6_7_autodock: +2.31	CYP2D6_7_xscore: -8.75688
CYP2D6_8_autodock: +9.95	CYP2D6_8_xscore: -8.7296
CYP2D6_9_autodock: +10.61	CYP2D6_9_xscore: -8.85236
CYP2D6_10_autodock: -2.32	CYP2D6_10_xscore: -9.69804
CYP2D6_11_autodock: +28.49	CYP2D6_11_xscore: -8.02032
CYP2D6_12_autodock: +11.31	CYP2D6_12_xscore: -8.5932
CYP2D6_13_autodock: +3.45	CYP2D6_13_xscore: -8.7296
CYP2D6_14_autodock: +4.46	CYP2D6_14_xscore: -8.9342
CYP2D6_15_autodock: +8.37	CYP2D6_15_xscore: -8.97512
CYP2D6_16_autodock: +2.33	CYP2D6_16_xscore: -8.83872

CYP2D6_17_autodock: +46.43 CYP2D6_17_xscore: -8.184
CYP2D6_18_autodock: +34.60 CYP2D6_18_xscore: -8.12944
CYP2D6_19_autodock: +13.95 CYP2D6_19_xscore: -9.12516
CYP2D6_20_autodock: +29.04 CYP2D6_20_xscore: -8.90692
Ki or IC50 = 2.49

Compound: ly326869

FormalCharge: 0 Num_PositiveAtoms: 0
Num_AromaticRings: 1 Num_H_Acceptors: 6
Num_H_Donors: 2 Molecular_Weight: 241.67747
ALogP: 0.598 Num_Rotatable_Bonds: 3

CYP2D6_1_autodock: -6.53	CYP2D6_1_xscore: -6.79272
CYP2D6_2_autodock: -6.84	CYP2D6_2_xscore: -6.73816
CYP2D6_3_autodock: -6.81	CYP2D6_3_xscore: -6.71088
CYP2D6_4_autodock: -6.67	CYP2D6_4_xscore: -6.86092
CYP2D6_5_autodock: -6.82	CYP2D6_5_xscore: -7.03824
CYP2D6_6_autodock: -6.93	CYP2D6_6_xscore: -7.2292
CYP2D6_7_autodock: -6.96	CYP2D6_7_xscore: -6.83364
CYP2D6_8_autodock: -7.50	CYP2D6_8_xscore: -6.84728
CYP2D6_9_autodock: -7.46	CYP2D6_9_xscore: -6.66996
CYP2D6_10_autodock: -7.67	CYP2D6_10_xscore: -6.64268
CYP2D6_11_autodock: -7.72	CYP2D6_11_xscore: -6.92912
CYP2D6_12_autodock: -6.39	CYP2D6_12_xscore: -6.8882
CYP2D6_13_autodock: -6.82	CYP2D6_13_xscore: -6.56084
CYP2D6_14_autodock: -6.86	CYP2D6_14_xscore: -7.01096
CYP2D6_15_autodock: -5.94	CYP2D6_15_xscore: -7.01096
CYP2D6_16_autodock: -6.96	CYP2D6_16_xscore: -6.65632
CYP2D6_17_autodock: -7.91	CYP2D6_17_xscore: -6.87456
CYP2D6_18_autodock: -7.53	CYP2D6_18_xscore: -6.90184
CYP2D6_19_autodock: -7.99	CYP2D6_19_xscore: -6.71088
CYP2D6_20_autodock: -6.75	CYP2D6_20_xscore: -6.80636

Ki or IC50 = 89.3

Compound: ly333531

FormalCharge: -1 Num_PositiveAtoms: 0
Num_AromaticRings: 4 Num_H_Acceptors: 4
Num_H_Donors: 0 Molecular_Weight: 467.53898
ALogP: 3.583 Num_Rotatable_Bonds: 2

CYP2D6_1_autodock: -4.29	CYP2D6_1_xscore: -8.85236
CYP2D6_2_autodock: +6.91	CYP2D6_2_xscore: -8.42952
CYP2D6_3_autodock: +12.42	CYP2D6_3_xscore: -8.29312
CYP2D6_4_autodock: -5.08	CYP2D6_4_xscore: -8.78416
CYP2D6_5_autodock: -3.01	CYP2D6_5_xscore: -9.0706
CYP2D6_6_autodock: -10.35	CYP2D6_6_xscore: -9.08424
CYP2D6_7_autodock: +7.01	CYP2D6_7_xscore: -8.83872
CYP2D6_8_autodock: -0.65	CYP2D6_8_xscore: -8.34768

CYP2D6_9_autodock: -9.49	CYP2D6_9_xscore: -9.04332
CYP2D6_10_autodock: -6.87	CYP2D6_10_xscore: -8.98876
CYP2D6_11_autodock: -2.03	CYP2D6_11_xscore: -8.9342
CYP2D6_12_autodock: +0.10	CYP2D6_12_xscore: -8.64776
CYP2D6_13_autodock: -7.20	CYP2D6_13_xscore: -8.96148
CYP2D6_14_autodock: +0.96	CYP2D6_14_xscore: -8.55228
CYP2D6_15_autodock: -2.87	CYP2D6_15_xscore: -8.60684
CYP2D6_16_autodock: +13.39	CYP2D6_16_xscore: -8.53864
CYP2D6_17_autodock: +2.83	CYP2D6_17_xscore: -8.3204
CYP2D6_18_autodock: +6.09	CYP2D6_18_xscore: -8.55228
CYP2D6_19_autodock: -3.80	CYP2D6_19_xscore: -8.68868
CYP2D6_20_autodock: +17.17	CYP2D6_20_xscore: -8.4568

Ki or IC50 = 0.17

Compound: ly353381

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1
Num_AromaticRings: 4 Num_H_Acceptors: 4
Num_H_Donors: 2 Molecular_Weight: 476.6071
ALogP: 5.282 Num_Rotatable_Bonds: 9

CYP2D6_1_autodock: +0.29	CYP2D6_1_xscore: -9.04332
CYP2D6_2_autodock: +9.04	CYP2D6_2_xscore: -8.94784
CYP2D6_3_autodock: +17.75	CYP2D6_3_xscore: -8.78416
CYP2D6_4_autodock: -0.71	CYP2D6_4_xscore: -9.22064
CYP2D6_5_autodock: +33.53	CYP2D6_5_xscore: -8.33404
CYP2D6_6_autodock: -1.46	CYP2D6_6_xscore: -8.6614
CYP2D6_7_autodock: +3.25	CYP2D6_7_xscore: -9.0706
CYP2D6_8_autodock: +1.45	CYP2D6_8_xscore: -8.97512
CYP2D6_9_autodock: -1.84	CYP2D6_9_xscore: -8.55228
CYP2D6_10_autodock: -0.92	CYP2D6_10_xscore: -9.3434
CYP2D6_11_autodock: -1.86	CYP2D6_11_xscore: -9.43888
CYP2D6_12_autodock: +0.12	CYP2D6_12_xscore: -9.02968
CYP2D6_13_autodock: +0.41	CYP2D6_13_xscore: -8.56592
CYP2D6_14_autodock: -0.43	CYP2D6_14_xscore: -9.19336
CYP2D6_15_autodock: +0.07	CYP2D6_15_xscore: -8.96148
CYP2D6_16_autodock: +1.34	CYP2D6_16_xscore: -8.68868
CYP2D6_17_autodock: +2.13	CYP2D6_17_xscore: -8.96148
CYP2D6_18_autodock: -0.06	CYP2D6_18_xscore: -9.2752
CYP2D6_19_autodock: +0.88	CYP2D6_19_xscore: -9.24792
CYP2D6_20_autodock: +8.61	CYP2D6_20_xscore: -8.87964

Ki or IC50 = 2.4

Compound: n-benzylquinium-chloride

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1
Num_AromaticRings: 3 Num_H_Acceptors: 3
Num_H_Donors: 1 Molecular_Weight: 401.52066
ALogP: 2.955 Num_Rotatable_Bonds: 6

CYP2D6_1_autodock: -3.70	CYP2D6_1_xscore: -9.45252
CYP2D6_2_autodock: -2.65	CYP2D6_2_xscore: -9.09788
CYP2D6_3_autodock: +1.49	CYP2D6_3_xscore: -9.30248
CYP2D6_4_autodock: -1.98	CYP2D6_4_xscore: -9.3434
CYP2D6_5_autodock: -1.08	CYP2D6_5_xscore: -9.35704
CYP2D6_6_autodock: -4.54	CYP2D6_6_xscore: -8.98876
CYP2D6_7_autodock: -2.26	CYP2D6_7_xscore: -9.35704
CYP2D6_8_autodock: +0.19	CYP2D6_8_xscore: -8.56592
CYP2D6_9_autodock: -5.03	CYP2D6_9_xscore: -9.09788
CYP2D6_10_autodock: -3.57	CYP2D6_10_xscore: -9.15244
CYP2D6_11_autodock: -0.80	CYP2D6_11_xscore: -9.19336
CYP2D6_12_autodock: -1.83	CYP2D6_12_xscore: -9.4798
CYP2D6_13_autodock: -3.16	CYP2D6_13_xscore: -9.50708
CYP2D6_14_autodock: -4.49	CYP2D6_14_xscore: -9.60256
CYP2D6_15_autodock: -3.42	CYP2D6_15_xscore: -9.38432
CYP2D6_16_autodock: -3.08	CYP2D6_16_xscore: -9.22064
CYP2D6_17_autodock: -0.12	CYP2D6_17_xscore: -9.35704
CYP2D6_18_autodock: -2.69	CYP2D6_18_xscore: -9.2752
CYP2D6_19_autodock: -5.07	CYP2D6_19_xscore: -8.81144
CYP2D6_20_autodock: +0.94	CYP2D6_20_xscore: -9.28884

Ki or IC50 = 25.0

Compound: norfluoxetine-r

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1

Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 1

Num_H_Donors: 1 Molecular_Weight: 296.30748

ALogP: 2.596 Num_Rotatable_Bonds: 7

CYP2D6_1_autodock: -6.22	CYP2D6_1_xscore: -8.44316
CYP2D6_2_autodock: -5.25	CYP2D6_2_xscore: -8.06124
CYP2D6_3_autodock: -5.10	CYP2D6_3_xscore: -8.17036
CYP2D6_4_autodock: -6.12	CYP2D6_4_xscore: -8.40224
CYP2D6_5_autodock: -4.46	CYP2D6_5_xscore: -8.37496
CYP2D6_6_autodock: -5.60	CYP2D6_6_xscore: -7.87028
CYP2D6_7_autodock: -5.87	CYP2D6_7_xscore: -7.99304
CYP2D6_8_autodock: -6.33	CYP2D6_8_xscore: -8.15672
CYP2D6_9_autodock: -6.61	CYP2D6_9_xscore: -8.08852
CYP2D6_10_autodock: -5.95	CYP2D6_10_xscore: -7.89756
CYP2D6_11_autodock: -6.27	CYP2D6_11_xscore: -7.99304
CYP2D6_12_autodock: -6.04	CYP2D6_12_xscore: -8.3886
CYP2D6_13_autodock: -6.89	CYP2D6_13_xscore: -8.15672
CYP2D6_14_autodock: -5.25	CYP2D6_14_xscore: -8.3204
CYP2D6_15_autodock: -4.95	CYP2D6_15_xscore: -8.184
CYP2D6_16_autodock: -5.20	CYP2D6_16_xscore: -7.93848
CYP2D6_17_autodock: -5.41	CYP2D6_17_xscore: -8.2522
CYP2D6_18_autodock: -6.23	CYP2D6_18_xscore: -8.03396
CYP2D6_19_autodock: -7.13	CYP2D6_19_xscore: -8.02032

CYP2D6_20_autodock: -5.72 CYP2D6_20_xscore: -8.36132
Ki or IC50 = 1.48

Compound: norfluoxetine-s

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1

Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 1

Num_H_Donors: 1 Molecular_Weight: 296.30748

ALogP: 2.596 Num_Rotatable_Bonds: 7

CYP2D6_1_autodock: -5.42	CYP2D6_1_xscore: -8.27948
CYP2D6_2_autodock: -4.86	CYP2D6_2_xscore: -8.19764
CYP2D6_3_autodock: -6.00	CYP2D6_3_xscore: -8.29312
CYP2D6_4_autodock: -5.83	CYP2D6_4_xscore: -8.19764
CYP2D6_5_autodock: -4.99	CYP2D6_5_xscore: -8.4568
CYP2D6_6_autodock: -5.71	CYP2D6_6_xscore: -7.6384
CYP2D6_7_autodock: -5.45	CYP2D6_7_xscore: -7.99304
CYP2D6_8_autodock: -6.98	CYP2D6_8_xscore: -8.17036
CYP2D6_9_autodock: -6.99	CYP2D6_9_xscore: -7.66568
CYP2D6_10_autodock: -6.03	CYP2D6_10_xscore: -7.96576
CYP2D6_11_autodock: -4.71	CYP2D6_11_xscore: -7.96576
CYP2D6_12_autodock: -4.73	CYP2D6_12_xscore: -8.02032
CYP2D6_13_autodock: -6.49	CYP2D6_13_xscore: -8.07488
CYP2D6_14_autodock: -5.64	CYP2D6_14_xscore: -8.1158
CYP2D6_15_autodock: -6.21	CYP2D6_15_xscore: -7.80208
CYP2D6_16_autodock: -5.78	CYP2D6_16_xscore: -8.08852
CYP2D6_17_autodock: -6.55	CYP2D6_17_xscore: -7.9112
CYP2D6_18_autodock: -6.55	CYP2D6_18_xscore: -8.00668
CYP2D6_19_autodock: -6.82	CYP2D6_19_xscore: -8.14308
CYP2D6_20_autodock: -6.28	CYP2D6_20_xscore: -8.33404

Ki or IC50 = 0.31

Compound: nsc-100857

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1

Num_AromaticRings: 1 Num_H_Acceptors: 4

Num_H_Donors: 3 Molecular_Weight: 245.30027

ALogP: -0.37 Num_Rotatable_Bonds: 6

CYP2D6_1_autodock: -7.36	CYP2D6_1_xscore: -7.55656
CYP2D6_2_autodock: -6.85	CYP2D6_2_xscore: -7.39288
CYP2D6_3_autodock: -7.97	CYP2D6_3_xscore: -7.3656
CYP2D6_4_autodock: -8.83	CYP2D6_4_xscore: -7.47472
CYP2D6_5_autodock: -6.69	CYP2D6_5_xscore: -7.6384
CYP2D6_6_autodock: -8.86	CYP2D6_6_xscore: -7.0928
CYP2D6_7_autodock: -9.60	CYP2D6_7_xscore: -7.55656
CYP2D6_8_autodock: -9.44	CYP2D6_8_xscore: -7.5702
CYP2D6_9_autodock: -9.55	CYP2D6_9_xscore: -7.25648
CYP2D6_10_autodock: -8.76	CYP2D6_10_xscore: -7.3656
CYP2D6_11_autodock: -7.31	CYP2D6_11_xscore: -7.5702

CYP2D6_12_autodock: -7.94	CYP2D6_12_xscore: -7.6384
CYP2D6_13_autodock: -8.85	CYP2D6_13_xscore: -7.27012
CYP2D6_14_autodock: -7.23	CYP2D6_14_xscore: -7.51564
CYP2D6_15_autodock: -6.80	CYP2D6_15_xscore: -7.2974
CYP2D6_16_autodock: -8.36	CYP2D6_16_xscore: -7.82936
CYP2D6_17_autodock: -9.03	CYP2D6_17_xscore: -7.33832
CYP2D6_18_autodock: -8.10	CYP2D6_18_xscore: -7.39288
CYP2D6_19_autodock: -10.28	CYP2D6_19_xscore: -7.5702
CYP2D6_20_autodock: -7.94	CYP2D6_20_xscore: -7.93848

Ki or IC50 = 234

Compound: nsc-10777

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1

Num_AromaticRings: 1 Num_H_Acceptors: 2

Num_H_Donors: 1 Molecular_Weight: 306.27436

ALogP: 2.092 Num_Rotatable_Bonds: 7

CYP2D6_1_autodock: -9.22	CYP2D6_1_xscore: -8.49772
CYP2D6_2_autodock: -9.86	CYP2D6_2_xscore: -8.08852
CYP2D6_3_autodock: -9.14	CYP2D6_3_xscore: -8.06124
CYP2D6_4_autodock: -10.74	CYP2D6_4_xscore: -8.2522
CYP2D6_5_autodock: -7.94	CYP2D6_5_xscore: -8.55228
CYP2D6_6_autodock: -10.01	CYP2D6_6_xscore: -7.73388
CYP2D6_7_autodock: -10.13	CYP2D6_7_xscore: -8.63412
CYP2D6_8_autodock: -9.38	CYP2D6_8_xscore: -8.00668
CYP2D6_9_autodock: -9.69	CYP2D6_9_xscore: -7.843
CYP2D6_10_autodock: -9.93	CYP2D6_10_xscore: -8.00668
CYP2D6_11_autodock: -9.11	CYP2D6_11_xscore: -7.85664
CYP2D6_12_autodock: -9.87	CYP2D6_12_xscore: -8.07488
CYP2D6_13_autodock: -9.22	CYP2D6_13_xscore: -7.87028
CYP2D6_14_autodock: -9.76	CYP2D6_14_xscore: -7.96576
CYP2D6_15_autodock: -9.34	CYP2D6_15_xscore: -7.88392
CYP2D6_16_autodock: -9.59	CYP2D6_16_xscore: -7.88392
CYP2D6_17_autodock: -9.74	CYP2D6_17_xscore: -8.40224
CYP2D6_18_autodock: -9.10	CYP2D6_18_xscore: -8.27948
CYP2D6_19_autodock: -10.55	CYP2D6_19_xscore: -8.33404
CYP2D6_20_autodock: -10.17	CYP2D6_20_xscore: -8.10216

Ki or IC50 = 2.1

Compound: nsc-122451

FormalCharge: 0 Num_PositiveAtoms: 1

Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 2

Num_H_Donors: 1 Molecular_Weight: 241.28509

ALogP: -0.124 Num_Rotatable_Bonds: 6

CYP2D6_1_autodock: -10.01	CYP2D6_1_xscore: -8.71596
CYP2D6_2_autodock: -7.22	CYP2D6_2_xscore: -8.48408
CYP2D6_3_autodock: -9.05	CYP2D6_3_xscore: -8.30676

CYP2D6_4_autodock: -8.96	CYP2D6_4_xscore: -8.34768
CYP2D6_5_autodock: -9.35	CYP2D6_5_xscore: -8.68868
CYP2D6_6_autodock: -9.12	CYP2D6_6_xscore: -8.34768
CYP2D6_7_autodock: -10.15	CYP2D6_7_xscore: -8.63412
CYP2D6_8_autodock: -8.86	CYP2D6_8_xscore: -8.03396
CYP2D6_9_autodock: -11.02	CYP2D6_9_xscore: -7.99304
CYP2D6_10_autodock: -9.23	CYP2D6_10_xscore: -8.27948
CYP2D6_11_autodock: -8.80	CYP2D6_11_xscore: -8.37496
CYP2D6_12_autodock: -7.49	CYP2D6_12_xscore: -8.184
CYP2D6_13_autodock: -7.64	CYP2D6_13_xscore: -8.49772
CYP2D6_14_autodock: -8.81	CYP2D6_14_xscore: -8.51136
CYP2D6_15_autodock: -8.30	CYP2D6_15_xscore: -8.33404
CYP2D6_16_autodock: -9.38	CYP2D6_16_xscore: -8.4568
CYP2D6_17_autodock: -8.72	CYP2D6_17_xscore: -8.56592
CYP2D6_18_autodock: -9.71	CYP2D6_18_xscore: -8.7978
CYP2D6_19_autodock: -10.54	CYP2D6_19_xscore: -8.27948
CYP2D6_20_autodock: -7.93	CYP2D6_20_xscore: -8.48408

Ki or IC50 = 570

Compound: nsc-13239

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1

Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 2

Num_H_Donors: 2 Molecular_Weight: 264.77376

ALogP: 1.919 Num_Rotatable_Bonds: 5

CYP2D6_1_autodock: -8.97	CYP2D6_1_xscore: -7.92484
CYP2D6_2_autodock: -4.59	CYP2D6_2_xscore: -7.69296
CYP2D6_3_autodock: -5.37	CYP2D6_3_xscore: -7.74752
CYP2D6_4_autodock: -8.57	CYP2D6_4_xscore: -7.89756
CYP2D6_5_autodock: -8.36	CYP2D6_5_xscore: -8.10216
CYP2D6_6_autodock: -9.94	CYP2D6_6_xscore: -7.81572
CYP2D6_7_autodock: -8.79	CYP2D6_7_xscore: -7.7066
CYP2D6_8_autodock: -4.06	CYP2D6_8_xscore: -7.66568
CYP2D6_9_autodock: -11.50	CYP2D6_9_xscore: -7.7748
CYP2D6_10_autodock: -10.59	CYP2D6_10_xscore: -7.9794
CYP2D6_11_autodock: -9.43	CYP2D6_11_xscore: -8.33404
CYP2D6_12_autodock: -8.68	CYP2D6_12_xscore: -7.80208
CYP2D6_13_autodock: -8.68	CYP2D6_13_xscore: -7.93848
CYP2D6_14_autodock: -10.28	CYP2D6_14_xscore: -8.21128
CYP2D6_15_autodock: -9.05	CYP2D6_15_xscore: -7.99304
CYP2D6_16_autodock: -10.39	CYP2D6_16_xscore: -7.88392
CYP2D6_17_autodock: -7.37	CYP2D6_17_xscore: -7.93848
CYP2D6_18_autodock: -8.85	CYP2D6_18_xscore: -7.87028
CYP2D6_19_autodock: -4.68	CYP2D6_19_xscore: -7.54292
CYP2D6_20_autodock: -7.21	CYP2D6_20_xscore: -7.88392

Ki or IC50 = 2.2

Compound: nsc-142496

FormalCharge: 0 Num_PositiveAtoms: 0

Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 2

Num_H_Donors: 1 Molecular_Weight: 321.24422

ALogP: 4.266 Num_Rotatable_Bonds: 15

CYP2D6_1_autodock: -6.58	CYP2D6_1_xscore: -6.66996
CYP2D6_2_autodock: -5.96	CYP2D6_2_xscore: -6.65632
CYP2D6_3_autodock: -7.65	CYP2D6_3_xscore: -6.72452
CYP2D6_4_autodock: -6.50	CYP2D6_4_xscore: -6.60176
CYP2D6_5_autodock: -6.70	CYP2D6_5_xscore: -6.99732
CYP2D6_6_autodock: -6.33	CYP2D6_6_xscore: -6.45172
CYP2D6_7_autodock: -6.88	CYP2D6_7_xscore: -6.62904
CYP2D6_8_autodock: -7.43	CYP2D6_8_xscore: -6.64268
CYP2D6_9_autodock: -8.12	CYP2D6_9_xscore: -6.42444
CYP2D6_10_autodock: -7.73	CYP2D6_10_xscore: -6.69724
CYP2D6_11_autodock: -5.97	CYP2D6_11_xscore: -6.87456
CYP2D6_12_autodock: -7.00	CYP2D6_12_xscore: -7.21556
CYP2D6_13_autodock: -6.88	CYP2D6_13_xscore: -6.58812
CYP2D6_14_autodock: -6.70	CYP2D6_14_xscore: -6.91548
CYP2D6_15_autodock: -6.34	CYP2D6_15_xscore: -6.53356
CYP2D6_16_autodock: -6.91	CYP2D6_16_xscore: -7.0246
CYP2D6_17_autodock: -6.90	CYP2D6_17_xscore: -6.79272
CYP2D6_18_autodock: -7.29	CYP2D6_18_xscore: -6.5472
CYP2D6_19_autodock: -8.62	CYP2D6_19_xscore: -6.6836
CYP2D6_20_autodock: -8.05	CYP2D6_20_xscore: -6.86092

Ki or IC50 = 7.3

Compound: nsc-142982

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1

Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 4

Num_H_Donors: 3 Molecular_Weight: 357.4897

ALogP: 2.002 Num_Rotatable_Bonds: 9

CYP2D6_1_autodock: -10.51	CYP2D6_1_xscore: -10.03904
CYP2D6_2_autodock: -10.25	CYP2D6_2_xscore: -10.01176
CYP2D6_3_autodock: -5.67	CYP2D6_3_xscore: -9.6844
CYP2D6_4_autodock: -9.91	CYP2D6_4_xscore: -10.10724
CYP2D6_5_autodock: -6.64	CYP2D6_5_xscore: -9.90264
CYP2D6_6_autodock: -9.74	CYP2D6_6_xscore: -9.39796
CYP2D6_7_autodock: -8.97	CYP2D6_7_xscore: -9.7526
CYP2D6_8_autodock: -6.31	CYP2D6_8_xscore: -9.23428
CYP2D6_9_autodock: -9.04	CYP2D6_9_xscore: -9.67076
CYP2D6_10_autodock: -11.62	CYP2D6_10_xscore: -9.69804
CYP2D6_11_autodock: -10.22	CYP2D6_11_xscore: -9.87536
CYP2D6_12_autodock: -9.87	CYP2D6_12_xscore: -9.97084
CYP2D6_13_autodock: -9.88	CYP2D6_13_xscore: -9.52072
CYP2D6_14_autodock: -10.29	CYP2D6_14_xscore: -9.84808

CYP2D6_15_autodock: -9.77	CYP2D6_15_xscore: -9.4116
CYP2D6_16_autodock: -8.19	CYP2D6_16_xscore: -9.62984
CYP2D6_17_autodock: -8.60	CYP2D6_17_xscore: -9.49344
CYP2D6_18_autodock: -7.00	CYP2D6_18_xscore: -9.77988
CYP2D6_19_autodock: -8.54	CYP2D6_19_xscore: -8.97512
CYP2D6_20_autodock: -8.15	CYP2D6_20_xscore: -9.548

Ki or IC50 = 1.5

Compound: nsc-163376

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1
Num_AromaticRings: 1 Num_H_Acceptors: 2
Num_H_Donors: 1 Molecular_Weight: 275.36602
ALogP: -0.424 Num_Rotatable_Bonds: 5

CYP2D6_1_autodock: -7.55	CYP2D6_1_xscore: -7.01096
CYP2D6_2_autodock: -8.69	CYP2D6_2_xscore: -7.39288
CYP2D6_3_autodock: -8.78	CYP2D6_3_xscore: -7.24284
CYP2D6_4_autodock: -7.45	CYP2D6_4_xscore: -7.2292
CYP2D6_5_autodock: -7.56	CYP2D6_5_xscore: -7.21556
CYP2D6_6_autodock: -7.63	CYP2D6_6_xscore: -7.25648
CYP2D6_7_autodock: -8.04	CYP2D6_7_xscore: -7.07916
CYP2D6_8_autodock: -8.46	CYP2D6_8_xscore: -6.99732
CYP2D6_9_autodock: -8.04	CYP2D6_9_xscore: -7.31104
CYP2D6_10_autodock: -8.32	CYP2D6_10_xscore: -6.91548
CYP2D6_11_autodock: -8.57	CYP2D6_11_xscore: -7.40652
CYP2D6_12_autodock: -8.22	CYP2D6_12_xscore: -7.0928
CYP2D6_13_autodock: -7.81	CYP2D6_13_xscore: -6.91548
CYP2D6_14_autodock: -8.16	CYP2D6_14_xscore: -6.98368
CYP2D6_15_autodock: -7.84	CYP2D6_15_xscore: -7.0928
CYP2D6_16_autodock: -8.17	CYP2D6_16_xscore: -7.01096
CYP2D6_17_autodock: -7.50	CYP2D6_17_xscore: -7.37924
CYP2D6_18_autodock: -7.86	CYP2D6_18_xscore: -7.21556
CYP2D6_19_autodock: -8.86	CYP2D6_19_xscore: -7.17464
CYP2D6_20_autodock: -8.01	CYP2D6_20_xscore: -7.161

Ki or IC50 = 554

Compound: nsc-169453

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1
Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 0
Num_H_Donors: 1 Molecular_Weight: 264.38467
ALogP: 3.005 Num_Rotatable_Bonds: 5

CYP2D6_1_autodock: -9.02	CYP2D6_1_xscore: -8.5932
CYP2D6_2_autodock: -7.42	CYP2D6_2_xscore: -8.82508
CYP2D6_3_autodock: -4.02	CYP2D6_3_xscore: -8.71596
CYP2D6_4_autodock: -9.59	CYP2D6_4_xscore: -8.96148
CYP2D6_5_autodock: -6.69	CYP2D6_5_xscore: -8.98876
CYP2D6_6_autodock: -7.87	CYP2D6_6_xscore: -8.33404

CYP2D6_7_autodock: -7.55	CYP2D6_7_xscore: -8.68868
CYP2D6_8_autodock: -3.54	CYP2D6_8_xscore: -8.36132
CYP2D6_9_autodock: -10.59	CYP2D6_9_xscore: -8.55228
CYP2D6_10_autodock: -9.21	CYP2D6_10_xscore: -8.78416
CYP2D6_11_autodock: -6.76	CYP2D6_11_xscore: -8.67504
CYP2D6_12_autodock: -6.69	CYP2D6_12_xscore: -8.70232
CYP2D6_13_autodock: -8.01	CYP2D6_13_xscore: -8.77052
CYP2D6_14_autodock: -9.01	CYP2D6_14_xscore: -8.97512
CYP2D6_15_autodock: -8.53	CYP2D6_15_xscore: -8.56592
CYP2D6_16_autodock: -8.49	CYP2D6_16_xscore: -8.21128
CYP2D6_17_autodock: -8.42	CYP2D6_17_xscore: -8.97512
CYP2D6_18_autodock: -4.43	CYP2D6_18_xscore: -8.74324
CYP2D6_19_autodock: -7.57	CYP2D6_19_xscore: -8.44316
CYP2D6_20_autodock: -3.68	CYP2D6_20_xscore: -8.63412

Ki or IC50 = 2.6

Compound: nsc-172112

FormalCharge: 0 Num_PositiveAtoms: 0
Num_AromaticRings: 0 Num_H_Acceptors: 3
Num_H_Donors: 1 Molecular_Weight: 336.25732
ALogP: 2.442 Num_Rotatable_Bonds: 6

CYP2D6_1_autodock: -6.70	CYP2D6_1_xscore: -6.91548
CYP2D6_2_autodock: -8.48	CYP2D6_2_xscore: -7.39288
CYP2D6_3_autodock: -7.94	CYP2D6_3_xscore: -7.0928
CYP2D6_4_autodock: -7.58	CYP2D6_4_xscore: -6.9564
CYP2D6_5_autodock: -6.87	CYP2D6_5_xscore: -7.161
CYP2D6_6_autodock: -7.74	CYP2D6_6_xscore: -7.10644
CYP2D6_7_autodock: -7.60	CYP2D6_7_xscore: -6.83364
CYP2D6_8_autodock: -7.70	CYP2D6_8_xscore: -6.90184
CYP2D6_9_autodock: -7.45	CYP2D6_9_xscore: -6.57448
CYP2D6_10_autodock: -7.50	CYP2D6_10_xscore: -6.71088
CYP2D6_11_autodock: -8.41	CYP2D6_11_xscore: -7.28376
CYP2D6_12_autodock: -10.31	CYP2D6_12_xscore: -7.01096
CYP2D6_13_autodock: -7.46	CYP2D6_13_xscore: -6.66996
CYP2D6_14_autodock: -7.55	CYP2D6_14_xscore: -6.9564
CYP2D6_15_autodock: -8.05	CYP2D6_15_xscore: -6.65632
CYP2D6_16_autodock: -8.77	CYP2D6_16_xscore: -6.53356
CYP2D6_17_autodock: -7.36	CYP2D6_17_xscore: -7.07916
CYP2D6_18_autodock: -7.42	CYP2D6_18_xscore: -6.98368
CYP2D6_19_autodock: -8.36	CYP2D6_19_xscore: -6.91548
CYP2D6_20_autodock: -7.70	CYP2D6_20_xscore: -6.90184

Ki or IC50 = 310

Compound: nsc-17383

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1
Num_AromaticRings: 3 Num_H_Acceptors: 1

Num_H_Donors: 1 Molecular_Weight: 345.90938

ALogP: 3.686 Num_Rotatable_Bonds: 11

CYP2D6_1_autodock: -9.74	CYP2D6_1_xscore: -9.52072
CYP2D6_2_autodock: -8.62	CYP2D6_2_xscore: -9.3434
CYP2D6_3_autodock: -6.92	CYP2D6_3_xscore: -9.16608
CYP2D6_4_autodock: -12.53	CYP2D6_4_xscore: -9.6162
CYP2D6_5_autodock: -0.10	CYP2D6_5_xscore: -9.1388
CYP2D6_6_autodock: -11.21	CYP2D6_6_xscore: -8.9342
CYP2D6_7_autodock: -9.12	CYP2D6_7_xscore: -9.65712
CYP2D6_8_autodock: -3.84	CYP2D6_8_xscore: -8.74324
CYP2D6_9_autodock: -10.72	CYP2D6_9_xscore: -8.866
CYP2D6_10_autodock: -12.63	CYP2D6_10_xscore: -9.43888
CYP2D6_11_autodock: -9.30	CYP2D6_11_xscore: -9.09788
CYP2D6_12_autodock: -7.55	CYP2D6_12_xscore: -9.0706
CYP2D6_13_autodock: -9.16	CYP2D6_13_xscore: -8.94784
CYP2D6_14_autodock: -12.52	CYP2D6_14_xscore: -9.65712
CYP2D6_15_autodock: -11.42	CYP2D6_15_xscore: -9.39796
CYP2D6_16_autodock: -12.22	CYP2D6_16_xscore: -9.35704
CYP2D6_17_autodock: -7.36	CYP2D6_17_xscore: -8.75688
CYP2D6_18_autodock: -6.46	CYP2D6_18_xscore: -8.90692
CYP2D6_19_autodock: -10.88	CYP2D6_19_xscore: -9.19336
CYP2D6_20_autodock: -0.05	CYP2D6_20_xscore: -8.83872

Ki or IC50 = 3.5

Compound: nsc-176327

FormalCharge: 2 Num_PositiveAtoms: 2

Num_AromaticRings: 3 Num_H_Acceptors: 2

Num_H_Donors: 2 Molecular_Weight: 335.4427

ALogP: 0.543 Num_Rotatable_Bonds: 5

CYP2D6_1_autodock: -8.48	CYP2D6_1_xscore: -7.3656
CYP2D6_2_autodock: -8.88	CYP2D6_2_xscore: -7.61112
CYP2D6_3_autodock: -9.66	CYP2D6_3_xscore: -7.21556
CYP2D6_4_autodock: -9.12	CYP2D6_4_xscore: -7.37924
CYP2D6_5_autodock: -8.95	CYP2D6_5_xscore: -7.6384
CYP2D6_6_autodock: -9.24	CYP2D6_6_xscore: -7.12008
CYP2D6_7_autodock: -9.24	CYP2D6_7_xscore: -7.35196
CYP2D6_8_autodock: -9.31	CYP2D6_8_xscore: -7.18828
CYP2D6_9_autodock: -9.74	CYP2D6_9_xscore: -7.12008
CYP2D6_10_autodock: -9.18	CYP2D6_10_xscore: -7.52928
CYP2D6_11_autodock: -9.01	CYP2D6_11_xscore: -7.37924
CYP2D6_12_autodock: -8.98	CYP2D6_12_xscore: -7.37924
CYP2D6_13_autodock: -8.56	CYP2D6_13_xscore: -6.99732
CYP2D6_14_autodock: -9.48	CYP2D6_14_xscore: -7.37924
CYP2D6_15_autodock: -8.37	CYP2D6_15_xscore: -7.32468
CYP2D6_16_autodock: -8.81	CYP2D6_16_xscore: -7.03824
CYP2D6_17_autodock: -9.16	CYP2D6_17_xscore: -7.51564

CYP2D6_18_autodock: -8.54 CYP2D6_18_xscore: -7.61112
CYP2D6_19_autodock: -10.02 CYP2D6_19_xscore: -7.33832
CYP2D6_20_autodock: -10.08 CYP2D6_20_xscore: -7.31104
Ki or IC50 = 2.4

Compound: nsc-178248

FormalCharge: 0 Num_PositiveAtoms: 0
Num_AromaticRings: 0 Num_H_Acceptors: 8
Num_H_Donors: 5 Molecular_Weight: 313.69224
ALogP: -1.897 Num_Rotatable_Bonds: 9

CYP2D6_1_autodock: -10.47	CYP2D6_1_xscore: -9.04332
CYP2D6_2_autodock: -10.01	CYP2D6_2_xscore: -8.89328
CYP2D6_3_autodock: -8.15	CYP2D6_3_xscore: -8.90692
CYP2D6_4_autodock: -9.54	CYP2D6_4_xscore: -9.0024
CYP2D6_5_autodock: -10.59	CYP2D6_5_xscore: -9.4798
CYP2D6_6_autodock: -9.24	CYP2D6_6_xscore: -8.60684
CYP2D6_7_autodock: -10.94	CYP2D6_7_xscore: -8.82508
CYP2D6_8_autodock: -8.63	CYP2D6_8_xscore: -8.77052
CYP2D6_9_autodock: -10.42	CYP2D6_9_xscore: -8.5932
CYP2D6_10_autodock: -10.15	CYP2D6_10_xscore: -9.0024
CYP2D6_11_autodock: -9.78	CYP2D6_11_xscore: -8.92056
CYP2D6_12_autodock: -10.90	CYP2D6_12_xscore: -9.11152
CYP2D6_13_autodock: -10.31	CYP2D6_13_xscore: -8.87964
CYP2D6_14_autodock: -11.24	CYP2D6_14_xscore: -8.87964
CYP2D6_15_autodock: -10.68	CYP2D6_15_xscore: -8.7978
CYP2D6_16_autodock: -10.15	CYP2D6_16_xscore: -8.74324
CYP2D6_17_autodock: -9.58	CYP2D6_17_xscore: -8.3886
CYP2D6_18_autodock: -8.04	CYP2D6_18_xscore: -8.92056
CYP2D6_19_autodock: -10.16	CYP2D6_19_xscore: -8.96148
CYP2D6_20_autodock: -10.38	CYP2D6_20_xscore: -9.09788

Ki or IC50 = 2021

Compound: nsc-180973

FormalCharge: 0 Num_PositiveAtoms: 0
Num_AromaticRings: 3 Num_H_Acceptors: 2
Num_H_Donors: 0 Molecular_Weight: 371.51456
ALogP: 6.319 Num_Rotatable_Bonds: 16

CYP2D6_1_autodock: -9.92	CYP2D6_1_xscore: -7.66568
CYP2D6_2_autodock: -2.45	CYP2D6_2_xscore: -7.25648
CYP2D6_3_autodock: -6.66	CYP2D6_3_xscore: -7.5702
CYP2D6_4_autodock: -12.20	CYP2D6_4_xscore: -7.85664
CYP2D6_5_autodock: -10.67	CYP2D6_5_xscore: -7.81572
CYP2D6_6_autodock: -10.86	CYP2D6_6_xscore: -7.27012
CYP2D6_7_autodock: -6.77	CYP2D6_7_xscore: -7.42016
CYP2D6_8_autodock: -6.19	CYP2D6_8_xscore: -7.31104
CYP2D6_9_autodock: -10.77	CYP2D6_9_xscore: -7.55656

CYP2D6_10_autodock: -9.59	CYP2D6_10_xscore: -7.9112
CYP2D6_11_autodock: -6.32	CYP2D6_11_xscore: -7.17464
CYP2D6_12_autodock: -7.66	CYP2D6_12_xscore: -7.51564
CYP2D6_13_autodock: -8.76	CYP2D6_13_xscore: -7.161
CYP2D6_14_autodock: -9.27	CYP2D6_14_xscore: -7.62476
CYP2D6_15_autodock: -11.02	CYP2D6_15_xscore: -7.39288
CYP2D6_16_autodock: -5.90	CYP2D6_16_xscore: -7.502
CYP2D6_17_autodock: -6.54	CYP2D6_17_xscore: -7.35196
CYP2D6_18_autodock: -5.00	CYP2D6_18_xscore: -7.0246
CYP2D6_19_autodock: -6.03	CYP2D6_19_xscore: -7.5702
CYP2D6_20_autodock: -2.00	CYP2D6_20_xscore: -7.46108

Ki or IC50 = 7.2

Compound: nsc-193457

FormalCharge: 0 Num_PositiveAtoms: 0
Num_AromaticRings: 1 Num_H_Acceptors: 4
Num_H_Donors: 1 Molecular_Weight: 260.74042
ALogP: 1.094 Num_Rotatable_Bonds: 9

CYP2D6_1_autodock: -11.35	CYP2D6_1_xscore: -9.19336
CYP2D6_2_autodock: -9.21	CYP2D6_2_xscore: -8.85236
CYP2D6_3_autodock: -8.11	CYP2D6_3_xscore: -8.67504
CYP2D6_4_autodock: -11.27	CYP2D6_4_xscore: -9.1388
CYP2D6_5_autodock: -3.42	CYP2D6_5_xscore: -8.96148
CYP2D6_6_autodock: -10.41	CYP2D6_6_xscore: -8.60684
CYP2D6_7_autodock: -10.68	CYP2D6_7_xscore: -8.94784
CYP2D6_8_autodock: -4.96	CYP2D6_8_xscore: -8.63412
CYP2D6_9_autodock: -11.20	CYP2D6_9_xscore: -8.51136
CYP2D6_10_autodock: -10.77	CYP2D6_10_xscore: -9.02968
CYP2D6_11_autodock: -10.82	CYP2D6_11_xscore: -9.11152
CYP2D6_12_autodock: -9.95	CYP2D6_12_xscore: -9.28884
CYP2D6_13_autodock: -10.38	CYP2D6_13_xscore: -9.207
CYP2D6_14_autodock: -10.01	CYP2D6_14_xscore: -8.81144
CYP2D6_15_autodock: -9.28	CYP2D6_15_xscore: -8.7978
CYP2D6_16_autodock: -7.18	CYP2D6_16_xscore: -8.63412
CYP2D6_17_autodock: -9.37	CYP2D6_17_xscore: -8.94784
CYP2D6_18_autodock: -6.00	CYP2D6_18_xscore: -8.55228
CYP2D6_19_autodock: -9.66	CYP2D6_19_xscore: -8.89328
CYP2D6_20_autodock: -9.05	CYP2D6_20_xscore: -9.22064

Ki or IC50 = 265

Compound: nsc-24915

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1
Num_AromaticRings: 1 Num_H_Acceptors: 2
Num_H_Donors: 2 Molecular_Weight: 232.75019
ALogP: 0.698 Num_Rotatable_Bonds: 4
CYP2D6_1_autodock: -9.92 CYP2D6_1_xscore: -8.89328

CYP2D6_2_autodock: -8.15	CYP2D6_2_xscore: -9.01604
CYP2D6_3_autodock: -9.60	CYP2D6_3_xscore: -9.04332
CYP2D6_4_autodock: -9.68	CYP2D6_4_xscore: -9.04332
CYP2D6_5_autodock: -10.11	CYP2D6_5_xscore: -9.04332
CYP2D6_6_autodock: -9.23	CYP2D6_6_xscore: -8.525
CYP2D6_7_autodock: -10.20	CYP2D6_7_xscore: -8.81144
CYP2D6_8_autodock: -8.34	CYP2D6_8_xscore: -8.94784
CYP2D6_9_autodock: -9.90	CYP2D6_9_xscore: -8.81144
CYP2D6_10_autodock: -9.53	CYP2D6_10_xscore: -8.98876
CYP2D6_11_autodock: -9.09	CYP2D6_11_xscore: -8.67504
CYP2D6_12_autodock: -8.69	CYP2D6_12_xscore: -8.87964
CYP2D6_13_autodock: -8.84	CYP2D6_13_xscore: -8.90692
CYP2D6_14_autodock: -10.08	CYP2D6_14_xscore: -8.9342
CYP2D6_15_autodock: -9.15	CYP2D6_15_xscore: -8.75688
CYP2D6_16_autodock: -8.48	CYP2D6_16_xscore: -8.85236
CYP2D6_17_autodock: -9.39	CYP2D6_17_xscore: -8.92056
CYP2D6_18_autodock: -8.28	CYP2D6_18_xscore: -8.82508
CYP2D6_19_autodock: -10.45	CYP2D6_19_xscore: -9.02968
CYP2D6_20_autodock: -8.35	CYP2D6_20_xscore: -9.1388

Ki or IC50 = 8

Compound: nsc-249992

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1

Num_AromaticRings: 4 Num_H_Acceptors: 4

Num_H_Donors: 2 Molecular_Weight: 394.4668

ALogP: 3.18 Num_Rotatable_Bonds: 4

CYP2D6_1_autodock: -9.21	CYP2D6_1_xscore: -7.80208
CYP2D6_2_autodock: -8.66	CYP2D6_2_xscore: -7.9112
CYP2D6_3_autodock: -8.81	CYP2D6_3_xscore: -7.95212
CYP2D6_4_autodock: -9.45	CYP2D6_4_xscore: -7.72024
CYP2D6_5_autodock: -8.91	CYP2D6_5_xscore: -8.08852
CYP2D6_6_autodock: -8.86	CYP2D6_6_xscore: -7.42016
CYP2D6_7_autodock: -9.17	CYP2D6_7_xscore: -8.0476
CYP2D6_8_autodock: -9.90	CYP2D6_8_xscore: -7.69296
CYP2D6_9_autodock: -10.21	CYP2D6_9_xscore: -7.66568
CYP2D6_10_autodock: -9.88	CYP2D6_10_xscore: -7.58384
CYP2D6_11_autodock: -8.20	CYP2D6_11_xscore: -7.93848
CYP2D6_12_autodock: -9.21	CYP2D6_12_xscore: -7.76116
CYP2D6_13_autodock: -9.29	CYP2D6_13_xscore: -7.7748
CYP2D6_14_autodock: -8.71	CYP2D6_14_xscore: -8.0476
CYP2D6_15_autodock: -8.39	CYP2D6_15_xscore: -7.74752
CYP2D6_16_autodock: -9.10	CYP2D6_16_xscore: -7.74752
CYP2D6_17_autodock: -8.84	CYP2D6_17_xscore: -7.95212
CYP2D6_18_autodock: -8.40	CYP2D6_18_xscore: -7.7748
CYP2D6_19_autodock: -11.05	CYP2D6_19_xscore: -7.74752
CYP2D6_20_autodock: -8.93	CYP2D6_20_xscore: -7.81572

Ki or IC50 = 10.2

Compound: nsc-267213

FormalCharge: -1 Num_PositiveAtoms: 0

Num_AromaticRings: 1 Num_H_Acceptors: 6

Num_H_Donors: 1 Molecular_Weight: 257.24316

ALogP: -1.101 Num_Rotatable_Bonds: 9

CYP2D6_1_autodock: -8.25	CYP2D6_1_xscore: -8.12944
CYP2D6_2_autodock: -8.13	CYP2D6_2_xscore: -8.17036
CYP2D6_3_autodock: -9.08	CYP2D6_3_xscore: -8.17036
CYP2D6_4_autodock: -8.64	CYP2D6_4_xscore: -8.33404
CYP2D6_5_autodock: -8.47	CYP2D6_5_xscore: -8.27948
CYP2D6_6_autodock: -8.32	CYP2D6_6_xscore: -7.76116
CYP2D6_7_autodock: -8.41	CYP2D6_7_xscore: -8.03396
CYP2D6_8_autodock: -8.43	CYP2D6_8_xscore: -8.36132
CYP2D6_9_autodock: -9.39	CYP2D6_9_xscore: -7.88392
CYP2D6_10_autodock: -8.83	CYP2D6_10_xscore: -8.15672
CYP2D6_11_autodock: -7.91	CYP2D6_11_xscore: -7.96576
CYP2D6_12_autodock: -9.82	CYP2D6_12_xscore: -7.88392
CYP2D6_13_autodock: -7.84	CYP2D6_13_xscore: -7.88392
CYP2D6_14_autodock: -8.33	CYP2D6_14_xscore: -7.93848
CYP2D6_15_autodock: -7.63	CYP2D6_15_xscore: -7.9112
CYP2D6_16_autodock: -8.32	CYP2D6_16_xscore: -8.08852
CYP2D6_17_autodock: -7.85	CYP2D6_17_xscore: -8.06124
CYP2D6_18_autodock: -7.95	CYP2D6_18_xscore: -7.92484
CYP2D6_19_autodock: -9.08	CYP2D6_19_xscore: -7.88392
CYP2D6_20_autodock: -8.28	CYP2D6_20_xscore: -8.07488

Ki or IC50 = 288

Compound: nsc-278214

FormalCharge: 0 Num_PositiveAtoms: 0

Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 4

Num_H_Donors: 2 Molecular_Weight: 482.40006

ALogP: 5.662 Num_Rotatable_Bonds: 10

CYP2D6_1_autodock: -8.12	CYP2D6_1_xscore: -6.08344
CYP2D6_2_autodock: -8.45	CYP2D6_2_xscore: -6.02888
CYP2D6_3_autodock: -8.36	CYP2D6_3_xscore: -6.01524
CYP2D6_4_autodock: -8.02	CYP2D6_4_xscore: -6.04252
CYP2D6_5_autodock: -7.36	CYP2D6_5_xscore: -6.0016
CYP2D6_6_autodock: -8.56	CYP2D6_6_xscore: -6.57448
CYP2D6_7_autodock: -8.20	CYP2D6_7_xscore: -6.17892
CYP2D6_8_autodock: -8.51	CYP2D6_8_xscore: -5.8652
CYP2D6_9_autodock: -8.66	CYP2D6_9_xscore: -5.90612
CYP2D6_10_autodock: -8.68	CYP2D6_10_xscore: -5.94704
CYP2D6_11_autodock: -8.68	CYP2D6_11_xscore: -6.479
CYP2D6_12_autodock: -8.04	CYP2D6_12_xscore: -5.90612

CYP2D6_13_autodock: -8.62	CYP2D6_13_xscore: -5.78336
CYP2D6_14_autodock: -7.56	CYP2D6_14_xscore: -6.12436
CYP2D6_15_autodock: -7.05	CYP2D6_15_xscore: -5.89248
CYP2D6_16_autodock: -7.88	CYP2D6_16_xscore: -6.09708
CYP2D6_17_autodock: -8.63	CYP2D6_17_xscore: -6.16528
CYP2D6_18_autodock: -8.79	CYP2D6_18_xscore: -6.2062
CYP2D6_19_autodock: -9.58	CYP2D6_19_xscore: -6.15164
CYP2D6_20_autodock: -8.66	CYP2D6_20_xscore: -6.04252

Ki or IC50 = 11

Compound: nsc-293015

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1
Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 4
Num_H_Donors: 1 Molecular_Weight: 380.45684
ALogP: 2.302 Num_Rotatable_Bonds: 5

CYP2D6_1_autodock: -7.38	CYP2D6_1_xscore: -8.62048
CYP2D6_2_autodock: -5.93	CYP2D6_2_xscore: -8.6614
CYP2D6_3_autodock: -8.09	CYP2D6_3_xscore: -8.60684
CYP2D6_4_autodock: -7.14	CYP2D6_4_xscore: -8.49772
CYP2D6_5_autodock: -7.37	CYP2D6_5_xscore: -8.67504
CYP2D6_6_autodock: -7.35	CYP2D6_6_xscore: -8.17036
CYP2D6_7_autodock: -8.67	CYP2D6_7_xscore: -8.67504
CYP2D6_8_autodock: -7.24	CYP2D6_8_xscore: -8.14308
CYP2D6_9_autodock: -8.52	CYP2D6_9_xscore: -8.02032
CYP2D6_10_autodock: -8.89	CYP2D6_10_xscore: -8.00668
CYP2D6_11_autodock: -7.08	CYP2D6_11_xscore: -8.56592
CYP2D6_12_autodock: -7.69	CYP2D6_12_xscore: -8.70232
CYP2D6_13_autodock: -7.88	CYP2D6_13_xscore: -7.87028
CYP2D6_14_autodock: -6.71	CYP2D6_14_xscore: -8.53864
CYP2D6_15_autodock: -6.38	CYP2D6_15_xscore: -8.37496
CYP2D6_16_autodock: -7.41	CYP2D6_16_xscore: -8.21128
CYP2D6_17_autodock: -7.73	CYP2D6_17_xscore: -8.53864
CYP2D6_18_autodock: -8.53	CYP2D6_18_xscore: -8.12944
CYP2D6_19_autodock: -9.41	CYP2D6_19_xscore: -8.2522
CYP2D6_20_autodock: -6.80	CYP2D6_20_xscore: -8.41588

Ki or IC50 = 8.7

Compound: nsc-301739

FormalCharge: 2 Num_PositiveAtoms: 2
Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 8
Num_H_Donors: 8 Molecular_Weight: 446.4968
ALogP: -2.393 Num_Rotatable_Bonds: 1

CYP2D6_1_autodock: -8.89	CYP2D6_1_xscore: -7.82936
CYP2D6_2_autodock: -8.76	CYP2D6_2_xscore: -8.21128
CYP2D6_3_autodock: -8.57	CYP2D6_3_xscore: -7.78844
CYP2D6_4_autodock: -9.65	CYP2D6_4_xscore: -8.36132

CYP2D6_5_autodock: -8.71	CYP2D6_5_xscore: -8.3204
CYP2D6_6_autodock: -9.02	CYP2D6_6_xscore: -7.44744
CYP2D6_7_autodock: -9.17	CYP2D6_7_xscore: -7.843
CYP2D6_8_autodock: -9.47	CYP2D6_8_xscore: -7.80208
CYP2D6_9_autodock: -9.95	CYP2D6_9_xscore: -7.67932
CYP2D6_10_autodock: -8.83	CYP2D6_10_xscore: -7.87028
CYP2D6_11_autodock: -9.99	CYP2D6_11_xscore: -8.21128
CYP2D6_12_autodock: -8.96	CYP2D6_12_xscore: -8.37496
CYP2D6_13_autodock: -8.61	CYP2D6_13_xscore: -8.06124
CYP2D6_14_autodock: -9.03	CYP2D6_14_xscore: -8.21128
CYP2D6_15_autodock: -9.03	CYP2D6_15_xscore: -7.62476
CYP2D6_16_autodock: -9.14	CYP2D6_16_xscore: -7.95212
CYP2D6_17_autodock: -8.85	CYP2D6_17_xscore: -8.19764
CYP2D6_18_autodock: -9.34	CYP2D6_18_xscore: -8.184
CYP2D6_19_autodock: -11.28	CYP2D6_19_xscore: -7.843
CYP2D6_20_autodock: -9.22	CYP2D6_20_xscore: -7.843

Ki or IC50 = 76.3

Compound: nsc-303812

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1

Num_AromaticRings: 0 Num_H_Acceptors: 5

Num_H_Donors: 4 Molecular_Weight: 396.54082

ALogP: -5.6e-002 Num_Rotatable_Bonds: 2

CYP2D6_1_autodock: -9.76	CYP2D6_1_xscore: -8.82508
CYP2D6_2_autodock: -9.84	CYP2D6_2_xscore: -8.3886
CYP2D6_3_autodock: -8.19	CYP2D6_3_xscore: -8.7296
CYP2D6_4_autodock: -9.19	CYP2D6_4_xscore: -8.51136
CYP2D6_5_autodock: -5.83	CYP2D6_5_xscore: -8.49772
CYP2D6_6_autodock: -9.32	CYP2D6_6_xscore: -8.17036
CYP2D6_7_autodock: -8.85	CYP2D6_7_xscore: -8.40224
CYP2D6_8_autodock: -9.24	CYP2D6_8_xscore: -8.41588
CYP2D6_9_autodock: -9.55	CYP2D6_9_xscore: -8.27948
CYP2D6_10_autodock: -10.24	CYP2D6_10_xscore: -8.55228
CYP2D6_11_autodock: -8.28	CYP2D6_11_xscore: -8.81144
CYP2D6_12_autodock: -8.79	CYP2D6_12_xscore: -8.37496
CYP2D6_13_autodock: -10.27	CYP2D6_13_xscore: -8.62048
CYP2D6_14_autodock: -9.18	CYP2D6_14_xscore: -8.98876
CYP2D6_15_autodock: -8.90	CYP2D6_15_xscore: -8.184
CYP2D6_16_autodock: -8.67	CYP2D6_16_xscore: -8.22492
CYP2D6_17_autodock: -5.31	CYP2D6_17_xscore: -8.47044
CYP2D6_18_autodock: -8.07	CYP2D6_18_xscore: -8.21128
CYP2D6_19_autodock: -8.58	CYP2D6_19_xscore: -8.67504
CYP2D6_20_autodock: -4.76	CYP2D6_20_xscore: -8.0476

Ki or IC50 = 71

Compound: nsc-305884

FormalCharge: 0 Num_PositiveAtoms: 0
Num_AromaticRings: 4 Num_H_Acceptors: 4
Num_H_Donors: 2 Molecular_Weight: 345.39776
ALogP: 2.69 Num_Rotatable_Bonds: 5

CYP2D6_1_autodock: -6.09	CYP2D6_1_xscore: -8.41588
CYP2D6_2_autodock: -7.31	CYP2D6_2_xscore: -8.2522
CYP2D6_3_autodock: -6.51	CYP2D6_3_xscore: -7.9112
CYP2D6_4_autodock: -5.96	CYP2D6_4_xscore: -8.22492
CYP2D6_5_autodock: -5.78	CYP2D6_5_xscore: -8.40224
CYP2D6_6_autodock: -6.21	CYP2D6_6_xscore: -8.17036
CYP2D6_7_autodock: -6.63	CYP2D6_7_xscore: -8.02032
CYP2D6_8_autodock: -6.45	CYP2D6_8_xscore: -8.184
CYP2D6_9_autodock: -6.22	CYP2D6_9_xscore: -7.66568
CYP2D6_10_autodock: -5.99	CYP2D6_10_xscore: -7.61112
CYP2D6_11_autodock: -6.34	CYP2D6_11_xscore: -7.89756
CYP2D6_12_autodock: -6.18	CYP2D6_12_xscore: -7.92484
CYP2D6_13_autodock: -5.93	CYP2D6_13_xscore: -7.843
CYP2D6_14_autodock: -5.92	CYP2D6_14_xscore: -8.17036
CYP2D6_15_autodock: -6.95	CYP2D6_15_xscore: -8.15672
CYP2D6_16_autodock: -6.61	CYP2D6_16_xscore: -8.3886
CYP2D6_17_autodock: -6.05	CYP2D6_17_xscore: -8.12944
CYP2D6_18_autodock: -6.32	CYP2D6_18_xscore: -8.02032
CYP2D6_19_autodock: -7.86	CYP2D6_19_xscore: -8.08852
CYP2D6_20_autodock: -6.13	CYP2D6_20_xscore: -8.17036

Ki or IC50 = 18.1

Compound: nsc-3088
FormalCharge: -1 Num_PositiveAtoms: 0
Num_AromaticRings: 1 Num_H_Acceptors: 3
Num_H_Donors: 0 Molecular_Weight: 303.20422
ALogP: 2.425 Num_Rotatable_Bonds: 8

CYP2D6_1_autodock: -5.40	CYP2D6_1_xscore: -8.74324
CYP2D6_2_autodock: -3.34	CYP2D6_2_xscore: -9.01604
CYP2D6_3_autodock: -6.60	CYP2D6_3_xscore: -8.525
CYP2D6_4_autodock: -5.57	CYP2D6_4_xscore: -8.7296
CYP2D6_5_autodock: -2.47	CYP2D6_5_xscore: -8.71596
CYP2D6_6_autodock: -6.86	CYP2D6_6_xscore: -8.51136
CYP2D6_7_autodock: -4.88	CYP2D6_7_xscore: -8.525
CYP2D6_8_autodock: -6.00	CYP2D6_8_xscore: -8.78416
CYP2D6_9_autodock: -6.39	CYP2D6_9_xscore: -8.51136
CYP2D6_10_autodock: -6.59	CYP2D6_10_xscore: -8.4568
CYP2D6_11_autodock: -5.97	CYP2D6_11_xscore: -8.53864
CYP2D6_12_autodock: -6.06	CYP2D6_12_xscore: -8.6614
CYP2D6_13_autodock: -5.84	CYP2D6_13_xscore: -8.78416
CYP2D6_14_autodock: -5.16	CYP2D6_14_xscore: -8.7978
CYP2D6_15_autodock: -4.16	CYP2D6_15_xscore: -8.5932

CYP2D6_16_autodock: -5.13 CYP2D6_16_xscore: -8.525
CYP2D6_17_autodock: -2.96 CYP2D6_17_xscore: -8.4568
CYP2D6_18_autodock: -4.88 CYP2D6_18_xscore: -8.37496
CYP2D6_19_autodock: -8.48 CYP2D6_19_xscore: -8.83872
CYP2D6_20_autodock: -6.72 CYP2D6_20_xscore: -8.75688
Ki or IC50 = 65.1

Compound: nsc-308847

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1
Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 3
Num_H_Donors: 2 Molecular_Weight: 284.33302
ALogP: -0.398 Num_Rotatable_Bonds: 12

CYP2D6_1_autodock: -6.98	CYP2D6_1_xscore: -6.36988
CYP2D6_2_autodock: -7.58	CYP2D6_2_xscore: -6.31532
CYP2D6_3_autodock: -7.47	CYP2D6_3_xscore: -6.4108
CYP2D6_4_autodock: -7.78	CYP2D6_4_xscore: -6.479
CYP2D6_5_autodock: -7.83	CYP2D6_5_xscore: -6.39716
CYP2D6_6_autodock: -7.16	CYP2D6_6_xscore: -6.39716
CYP2D6_7_autodock: -7.73	CYP2D6_7_xscore: -6.30168
CYP2D6_8_autodock: -8.87	CYP2D6_8_xscore: -6.3426
CYP2D6_9_autodock: -7.23	CYP2D6_9_xscore: -6.11072
CYP2D6_10_autodock: -7.90	CYP2D6_10_xscore: -6.53356
CYP2D6_11_autodock: -8.88	CYP2D6_11_xscore: -6.62904
CYP2D6_12_autodock: -7.92	CYP2D6_12_xscore: -6.62904
CYP2D6_13_autodock: -7.20	CYP2D6_13_xscore: -6.138
CYP2D6_14_autodock: -8.29	CYP2D6_14_xscore: -6.42444
CYP2D6_15_autodock: -7.12	CYP2D6_15_xscore: -6.23348
CYP2D6_16_autodock: -7.37	CYP2D6_16_xscore: -6.479
CYP2D6_17_autodock: -6.89	CYP2D6_17_xscore: -6.23348
CYP2D6_18_autodock: -7.76	CYP2D6_18_xscore: -6.26076
CYP2D6_19_autodock: -8.56	CYP2D6_19_xscore: -6.09708
CYP2D6_20_autodock: -8.33	CYP2D6_20_xscore: -6.65632

Ki or IC50 = 39.6

Compound: nsc-314055

FormalCharge: 0 Num_PositiveAtoms: 1
Num_AromaticRings: 1 Num_H_Acceptors: 6
Num_H_Donors: 2 Molecular_Weight: 258.23125
ALogP: -1.454 Num_Rotatable_Bonds: 9

CYP2D6_1_autodock: -6.68	CYP2D6_1_xscore: -7.92484
CYP2D6_2_autodock: -4.51	CYP2D6_2_xscore: -7.59748
CYP2D6_3_autodock: -8.76	CYP2D6_3_xscore: -8.14308
CYP2D6_4_autodock: -6.64	CYP2D6_4_xscore: -7.9112
CYP2D6_5_autodock: -5.92	CYP2D6_5_xscore: -8.2522
CYP2D6_6_autodock: -7.10	CYP2D6_6_xscore: -7.59748
CYP2D6_7_autodock: -5.74	CYP2D6_7_xscore: -7.81572

CYP2D6_8_autodock: -5.51	CYP2D6_8_xscore: -7.85664
CYP2D6_9_autodock: -8.78	CYP2D6_9_xscore: -7.88392
CYP2D6_10_autodock: -6.59	CYP2D6_10_xscore: -7.93848
CYP2D6_11_autodock: -6.07	CYP2D6_11_xscore: -7.67932
CYP2D6_12_autodock: -6.05	CYP2D6_12_xscore: -7.61112
CYP2D6_13_autodock: -5.76	CYP2D6_13_xscore: -7.61112
CYP2D6_14_autodock: -7.14	CYP2D6_14_xscore: -8.06124
CYP2D6_15_autodock: -4.95	CYP2D6_15_xscore: -7.40652
CYP2D6_16_autodock: -6.91	CYP2D6_16_xscore: -7.80208
CYP2D6_17_autodock: -7.10	CYP2D6_17_xscore: -8.14308
CYP2D6_18_autodock: -5.84	CYP2D6_18_xscore: -7.82936
CYP2D6_19_autodock: -8.29	CYP2D6_19_xscore: -8.17036
CYP2D6_20_autodock: -3.39	CYP2D6_20_xscore: -7.55656

Ki or IC50 = 1017

Compound: nsc-320000

FormalCharge: 0 Num_PositiveAtoms: 0
Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 3
Num_H_Donors: 2 Molecular_Weight: 302.7555
ALogP: 2.055 Num_Rotatable_Bonds: 6

CYP2D6_1_autodock: -8.60	CYP2D6_1_xscore: -7.46108
CYP2D6_2_autodock: -7.82	CYP2D6_2_xscore: -7.0246
CYP2D6_3_autodock: -8.11	CYP2D6_3_xscore: -6.8882
CYP2D6_4_autodock: -9.76	CYP2D6_4_xscore: -7.44744
CYP2D6_5_autodock: -7.06	CYP2D6_5_xscore: -7.2974
CYP2D6_6_autodock: -9.04	CYP2D6_6_xscore: -6.92912
CYP2D6_7_autodock: -10.87	CYP2D6_7_xscore: -7.24284
CYP2D6_8_autodock: -7.81	CYP2D6_8_xscore: -7.12008
CYP2D6_9_autodock: -10.32	CYP2D6_9_xscore: -7.0246
CYP2D6_10_autodock: -9.46	CYP2D6_10_xscore: -7.37924
CYP2D6_11_autodock: -7.40	CYP2D6_11_xscore: -7.17464
CYP2D6_12_autodock: -7.94	CYP2D6_12_xscore: -6.98368
CYP2D6_13_autodock: -7.53	CYP2D6_13_xscore: -7.28376
CYP2D6_14_autodock: -8.92	CYP2D6_14_xscore: -7.40652
CYP2D6_15_autodock: -7.69	CYP2D6_15_xscore: -7.27012
CYP2D6_16_autodock: -10.21	CYP2D6_16_xscore: -7.76116
CYP2D6_17_autodock: -9.02	CYP2D6_17_xscore: -7.2292
CYP2D6_18_autodock: -7.39	CYP2D6_18_xscore: -6.73816
CYP2D6_19_autodock: -10.30	CYP2D6_19_xscore: -7.06552
CYP2D6_20_autodock: -5.25	CYP2D6_20_xscore: -6.99732

Ki or IC50 = 8.5

Compound: nsc-320846

FormalCharge: 0 Num_PositiveAtoms: 0
Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 3
Num_H_Donors: 1 Molecular_Weight: 249.26733

ALogP: 1.706 Num_Rotatable_Bonds: 6

CYP2D6_1_autodock: -6.33	CYP2D6_1_xscore: -7.9794
CYP2D6_2_autodock: -6.52	CYP2D6_2_xscore: -8.03396
CYP2D6_3_autodock: -6.86	CYP2D6_3_xscore: -8.02032
CYP2D6_4_autodock: -6.47	CYP2D6_4_xscore: -7.89756
CYP2D6_5_autodock: -6.76	CYP2D6_5_xscore: -8.0476
CYP2D6_6_autodock: -7.27	CYP2D6_6_xscore: -7.39288
CYP2D6_7_autodock: -6.83	CYP2D6_7_xscore: -7.55656
CYP2D6_8_autodock: -7.90	CYP2D6_8_xscore: -7.76116
CYP2D6_9_autodock: -7.45	CYP2D6_9_xscore: -7.44744
CYP2D6_10_autodock: -7.78	CYP2D6_10_xscore: -7.72024
CYP2D6_11_autodock: -5.79	CYP2D6_11_xscore: -7.843
CYP2D6_12_autodock: -6.60	CYP2D6_12_xscore: -7.73388
CYP2D6_13_autodock: -6.29	CYP2D6_13_xscore: -7.72024
CYP2D6_14_autodock: -6.51	CYP2D6_14_xscore: -8.02032
CYP2D6_15_autodock: -6.38	CYP2D6_15_xscore: -7.96576
CYP2D6_16_autodock: -6.94	CYP2D6_16_xscore: -7.82936
CYP2D6_17_autodock: -7.51	CYP2D6_17_xscore: -8.184
CYP2D6_18_autodock: -6.60	CYP2D6_18_xscore: -7.74752
CYP2D6_19_autodock: -8.83	CYP2D6_19_xscore: -7.81572
CYP2D6_20_autodock: -6.11	CYP2D6_20_xscore: -7.89756

Ki or IC50 = 48

Compound: nsc-321803

FormalCharge: 0 Num_PositiveAtoms: 1

Num_AromaticRings: 1 Num_H_Acceptors: 4

Num_H_Donors: 0 Molecular_Weight: 329.39022

ALogP: 4.058 Num_Rotatable_Bonds: 3

CYP2D6_1_autodock: -6.13	CYP2D6_1_xscore: -8.89328
CYP2D6_2_autodock: -5.95	CYP2D6_2_xscore: -8.78416
CYP2D6_3_autodock: -3.22	CYP2D6_3_xscore: -8.27948
CYP2D6_4_autodock: -6.68	CYP2D6_4_xscore: -8.866
CYP2D6_5_autodock: -4.19	CYP2D6_5_xscore: -8.78416
CYP2D6_6_autodock: -6.20	CYP2D6_6_xscore: -8.19764
CYP2D6_7_autodock: -5.97	CYP2D6_7_xscore: -8.90692
CYP2D6_8_autodock: -3.76	CYP2D6_8_xscore: -8.29312
CYP2D6_9_autodock: -6.99	CYP2D6_9_xscore: -8.62048
CYP2D6_10_autodock: -6.74	CYP2D6_10_xscore: -8.87964
CYP2D6_11_autodock: -5.29	CYP2D6_11_xscore: -8.92056
CYP2D6_12_autodock: -5.40	CYP2D6_12_xscore: -8.9342
CYP2D6_13_autodock: -5.71	CYP2D6_13_xscore: -8.71596
CYP2D6_14_autodock: -6.96	CYP2D6_14_xscore: -8.74324
CYP2D6_15_autodock: -5.47	CYP2D6_15_xscore: -8.5932
CYP2D6_16_autodock: -6.06	CYP2D6_16_xscore: -8.83872
CYP2D6_17_autodock: -7.30	CYP2D6_17_xscore: -8.7978
CYP2D6_18_autodock: -4.53	CYP2D6_18_xscore: -8.67504

CYP2D6_19_autodock: -7.42 CYP2D6_19_xscore: -8.41588
CYP2D6_20_autodock: -4.79 CYP2D6_20_xscore: -9.15244
Ki or IC50 = 196

Compound: nsc-329680

FormalCharge: 0 Num_PositiveAtoms: 0
Num_AromaticRings: 0 Num_H_Acceptors: 6
Num_H_Donors: 2 Molecular_Weight: 290.35762
ALogP: -0.562 Num_Rotatable_Bonds: 8

CYP2D6_1_autodock: -10.83	CYP2D6_1_xscore: -8.57956
CYP2D6_2_autodock: -8.08	CYP2D6_2_xscore: -8.19764
CYP2D6_3_autodock: -10.19	CYP2D6_3_xscore: -8.42952
CYP2D6_4_autodock: -11.22	CYP2D6_4_xscore: -8.78416
CYP2D6_5_autodock: -10.72	CYP2D6_5_xscore: -8.74324
CYP2D6_6_autodock: -10.29	CYP2D6_6_xscore: -8.19764
CYP2D6_7_autodock: -10.73	CYP2D6_7_xscore: -8.3886
CYP2D6_8_autodock: -9.51	CYP2D6_8_xscore: -8.184
CYP2D6_9_autodock: -11.23	CYP2D6_9_xscore: -8.34768
CYP2D6_10_autodock: -11.75	CYP2D6_10_xscore: -8.49772
CYP2D6_11_autodock: -9.46	CYP2D6_11_xscore: -8.525
CYP2D6_12_autodock: -8.93	CYP2D6_12_xscore: -8.19764
CYP2D6_13_autodock: -11.48	CYP2D6_13_xscore: -8.4568
CYP2D6_14_autodock: -10.64	CYP2D6_14_xscore: -8.62048
CYP2D6_15_autodock: -10.52	CYP2D6_15_xscore: -8.21128
CYP2D6_16_autodock: -10.33	CYP2D6_16_xscore: -8.47044
CYP2D6_17_autodock: -11.14	CYP2D6_17_xscore: -8.51136
CYP2D6_18_autodock: -10.13	CYP2D6_18_xscore: -8.34768
CYP2D6_19_autodock: -11.70	CYP2D6_19_xscore: -8.19764
CYP2D6_20_autodock: -10.03	CYP2D6_20_xscore: -8.37496

Ki or IC50 = 699

Compound: nsc-343513

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1
Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 2
Num_H_Donors: 2 Molecular_Weight: 374.44414
ALogP: 2.618 Num_Rotatable_Bonds: 3

CYP2D6_1_autodock: -5.81	CYP2D6_1_xscore: -7.99304
CYP2D6_2_autodock: -6.37	CYP2D6_2_xscore: -7.7066
CYP2D6_3_autodock: -7.07	CYP2D6_3_xscore: -7.9112
CYP2D6_4_autodock: -7.00	CYP2D6_4_xscore: -7.89756
CYP2D6_5_autodock: -6.01	CYP2D6_5_xscore: -7.46108
CYP2D6_6_autodock: -7.79	CYP2D6_6_xscore: -7.2974
CYP2D6_7_autodock: -6.92	CYP2D6_7_xscore: -7.78844
CYP2D6_8_autodock: -7.01	CYP2D6_8_xscore: -7.61112
CYP2D6_9_autodock: -7.74	CYP2D6_9_xscore: -7.39288
CYP2D6_10_autodock: -7.47	CYP2D6_10_xscore: -7.55656

CYP2D6_11_autodock: -5.41	CYP2D6_11_xscore: -7.87028
CYP2D6_12_autodock: -8.27	CYP2D6_12_xscore: -7.39288
CYP2D6_13_autodock: -8.45	CYP2D6_13_xscore: -7.54292
CYP2D6_14_autodock: -7.17	CYP2D6_14_xscore: -7.72024
CYP2D6_15_autodock: -7.16	CYP2D6_15_xscore: -7.35196
CYP2D6_16_autodock: -7.55	CYP2D6_16_xscore: -7.4338
CYP2D6_17_autodock: -5.84	CYP2D6_17_xscore: -7.7748
CYP2D6_18_autodock: -7.14	CYP2D6_18_xscore: -7.78844
CYP2D6_19_autodock: -9.10	CYP2D6_19_xscore: -7.54292
CYP2D6_20_autodock: -5.79	CYP2D6_20_xscore: -7.72024

Ki or IC50 = 1.6

Compound: nsc-372939

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 2
Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 7
Num_H_Donors: 4 Molecular_Weight: 318.3543
ALogP: -4.5e-002 Num_Rotatable_Bonds: 9

CYP2D6_1_autodock: -5.50	CYP2D6_1_xscore: -8.74324
CYP2D6_2_autodock: +27.49	CYP2D6_2_xscore: -8.40224
CYP2D6_3_autodock: +0.85	CYP2D6_3_xscore: -8.77052
CYP2D6_4_autodock: -4.79	CYP2D6_4_xscore: -9.08424
CYP2D6_5_autodock: +62.57	CYP2D6_5_xscore: -8.47044
CYP2D6_6_autodock: -3.91	CYP2D6_6_xscore: -8.70232
CYP2D6_7_autodock: -2.43	CYP2D6_7_xscore: -9.23428
CYP2D6_8_autodock: +22.34	CYP2D6_8_xscore: -8.68868
CYP2D6_9_autodock: -7.75	CYP2D6_9_xscore: -9.12516
CYP2D6_10_autodock: -5.88	CYP2D6_10_xscore: -9.1388
CYP2D6_11_autodock: +6.75	CYP2D6_11_xscore: -8.81144
CYP2D6_12_autodock: +6.56	CYP2D6_12_xscore: -8.5932
CYP2D6_13_autodock: -1.77	CYP2D6_13_xscore: -8.56592
CYP2D6_14_autodock: -6.65	CYP2D6_14_xscore: -8.90692
CYP2D6_15_autodock: -9.29	CYP2D6_15_xscore: -9.02968
CYP2D6_16_autodock: -2.53	CYP2D6_16_xscore: -9.05696
CYP2D6_17_autodock: +5.91	CYP2D6_17_xscore: -8.96148
CYP2D6_18_autodock: +9.41	CYP2D6_18_xscore: -8.67504
CYP2D6_19_autodock: +16.51	CYP2D6_19_xscore: -8.68868
CYP2D6_20_autodock: +23.81	CYP2D6_20_xscore: -8.87964

Ki or IC50 = 30

Compound: nsc-56410

FormalCharge: 0 Num_PositiveAtoms: 0
Num_AromaticRings: 0 Num_H_Acceptors: 8
Num_H_Donors: 2 Molecular_Weight: 348.3538
ALogP: -1.011 Num_Rotatable_Bonds: 4

CYP2D6_1_autodock: -9.72	CYP2D6_1_xscore: -8.7296
CYP2D6_2_autodock: -9.78	CYP2D6_2_xscore: -8.866

CYP2D6_3_autodock: -10.52	CYP2D6_3_xscore: -8.3886
CYP2D6_4_autodock: -10.40	CYP2D6_4_xscore: -8.85236
CYP2D6_5_autodock: -9.56	CYP2D6_5_xscore: -8.97512
CYP2D6_6_autodock: -10.75	CYP2D6_6_xscore: -8.02032
CYP2D6_7_autodock: -12.03	CYP2D6_7_xscore: -8.48408
CYP2D6_8_autodock: -11.87	CYP2D6_8_xscore: -8.30676
CYP2D6_9_autodock: -11.79	CYP2D6_9_xscore: -8.21128
CYP2D6_10_autodock: -11.23	CYP2D6_10_xscore: -8.08852
CYP2D6_11_autodock: -9.57	CYP2D6_11_xscore: -8.77052
CYP2D6_12_autodock: -11.58	CYP2D6_12_xscore: -8.57956
CYP2D6_13_autodock: -10.86	CYP2D6_13_xscore: -8.37496
CYP2D6_14_autodock: -10.25	CYP2D6_14_xscore: -8.7978
CYP2D6_15_autodock: -9.63	CYP2D6_15_xscore: -8.48408
CYP2D6_16_autodock: -11.55	CYP2D6_16_xscore: -8.525
CYP2D6_17_autodock: -10.94	CYP2D6_17_xscore: -8.47044
CYP2D6_18_autodock: -10.87	CYP2D6_18_xscore: -8.23856
CYP2D6_19_autodock: -12.96	CYP2D6_19_xscore: -8.48408
CYP2D6_20_autodock: -9.20	CYP2D6_20_xscore: -8.74324

Ki or IC50 = 94.3

Compound: pindolol

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1

Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 2

Num_H_Donors: 3 Molecular_Weight: 249.32873

ALogP: 0.694 Num_Rotatable_Bonds: 7

CYP2D6_1_autodock: -7.63	CYP2D6_1_xscore: -7.07916
CYP2D6_2_autodock: -7.91	CYP2D6_2_xscore: -7.07916
CYP2D6_3_autodock: -8.51	CYP2D6_3_xscore: -7.2974
CYP2D6_4_autodock: -7.90	CYP2D6_4_xscore: -7.46108
CYP2D6_5_autodock: -8.20	CYP2D6_5_xscore: -7.54292
CYP2D6_6_autodock: -7.84	CYP2D6_6_xscore: -7.06552
CYP2D6_7_autodock: -7.39	CYP2D6_7_xscore: -7.37924
CYP2D6_8_autodock: -8.94	CYP2D6_8_xscore: -7.27012
CYP2D6_9_autodock: -9.37	CYP2D6_9_xscore: -7.161
CYP2D6_10_autodock: -8.30	CYP2D6_10_xscore: -7.03824
CYP2D6_11_autodock: -7.77	CYP2D6_11_xscore: -7.28376
CYP2D6_12_autodock: -8.50	CYP2D6_12_xscore: -7.2292
CYP2D6_13_autodock: -7.52	CYP2D6_13_xscore: -7.17464
CYP2D6_14_autodock: -8.38	CYP2D6_14_xscore: -7.2974
CYP2D6_15_autodock: -7.16	CYP2D6_15_xscore: -7.0246
CYP2D6_16_autodock: -7.78	CYP2D6_16_xscore: -7.2292
CYP2D6_17_autodock: -8.60	CYP2D6_17_xscore: -7.61112
CYP2D6_18_autodock: -9.04	CYP2D6_18_xscore: -7.12008
CYP2D6_19_autodock: -9.49	CYP2D6_19_xscore: -7.51564
CYP2D6_20_autodock: -8.70	CYP2D6_20_xscore: -7.52928

Ki or IC50 = 4.8

Compound: quinine

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1

Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 3

Num_H_Donors: 2 Molecular_Weight: 325.4247

ALogP: 1.173 Num_Rotatable_Bonds: 5

CYP2D6_1_autodock: -6.21	CYP2D6_1_xscore: -8.30676
CYP2D6_2_autodock: -6.82	CYP2D6_2_xscore: -8.15672
CYP2D6_3_autodock: -5.86	CYP2D6_3_xscore: -8.70232
CYP2D6_4_autodock: -5.84	CYP2D6_4_xscore: -8.37496
CYP2D6_5_autodock: -3.36	CYP2D6_5_xscore: -8.53864
CYP2D6_6_autodock: -5.65	CYP2D6_6_xscore: -7.99304
CYP2D6_7_autodock: -5.59	CYP2D6_7_xscore: -8.41588
CYP2D6_8_autodock: -3.80	CYP2D6_8_xscore: -8.2522
CYP2D6_9_autodock: -5.77	CYP2D6_9_xscore: -8.06124
CYP2D6_10_autodock: -6.49	CYP2D6_10_xscore: -8.0476
CYP2D6_11_autodock: -4.18	CYP2D6_11_xscore: -8.49772
CYP2D6_12_autodock: -6.26	CYP2D6_12_xscore: -8.29312
CYP2D6_13_autodock: -6.54	CYP2D6_13_xscore: -8.47044
CYP2D6_14_autodock: -5.09	CYP2D6_14_xscore: -8.48408
CYP2D6_15_autodock: -4.86	CYP2D6_15_xscore: -8.37496
CYP2D6_16_autodock: -6.41	CYP2D6_16_xscore: -8.47044
CYP2D6_17_autodock: -4.06	CYP2D6_17_xscore: -8.07488
CYP2D6_18_autodock: -5.39	CYP2D6_18_xscore: -8.19764
CYP2D6_19_autodock: -5.80	CYP2D6_19_xscore: -8.51136
CYP2D6_20_autodock: -4.29	CYP2D6_20_xscore: -8.29312

Ki or IC50 = 4.6

Compound: quininone

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1

Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 3

Num_H_Donors: 1 Molecular_Weight: 323.40882

ALogP: 1.462 Num_Rotatable_Bonds: 4

CYP2D6_1_autodock: +51.92	CYP2D6_1_xscore: -8.56592
CYP2D6_2_autodock: +51.47	CYP2D6_2_xscore: -8.49772
CYP2D6_3_autodock: +51.45	CYP2D6_3_xscore: -8.75688
CYP2D6_4_autodock: +51.77	CYP2D6_4_xscore: -8.51136
CYP2D6_5_autodock: +53.17	CYP2D6_5_xscore: -8.6614
CYP2D6_6_autodock: +52.90	CYP2D6_6_xscore: -8.17036
CYP2D6_7_autodock: +52.06	CYP2D6_7_xscore: -8.63412
CYP2D6_8_autodock: +51.77	CYP2D6_8_xscore: -8.26584
CYP2D6_9_autodock: +50.75	CYP2D6_9_xscore: -8.08852
CYP2D6_10_autodock: +51.60	CYP2D6_10_xscore: -8.3204
CYP2D6_11_autodock: +52.56	CYP2D6_11_xscore: -8.7296
CYP2D6_12_autodock: +52.30	CYP2D6_12_xscore: -8.49772
CYP2D6_13_autodock: +52.65	CYP2D6_13_xscore: -8.62048

CYP2D6_14_autodock: +51.52	CYP2D6_14_xscore: -8.55228
CYP2D6_15_autodock: +52.29	CYP2D6_15_xscore: -8.77052
CYP2D6_16_autodock: +52.17	CYP2D6_16_xscore: -8.3886
CYP2D6_17_autodock: +52.05	CYP2D6_17_xscore: -8.30676
CYP2D6_18_autodock: +52.44	CYP2D6_18_xscore: -8.55228
CYP2D6_19_autodock: +51.27	CYP2D6_19_xscore: -8.51136
CYP2D6_20_autodock: +53.07	CYP2D6_20_xscore: -8.57956

Ki or IC50 = 0.72

Compound: quinoline

FormalCharge: 0 Num_PositiveAtoms: 0
Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 1
Num_H_Donors: 0 Molecular_Weight: 129.15858
ALogP: 2.016 Num_Rotatable_Bonds: 0

CYP2D6_1_autodock: -6.06	CYP2D6_1_xscore: -6.86092
CYP2D6_2_autodock: -5.91	CYP2D6_2_xscore: -7.0928
CYP2D6_3_autodock: -6.08	CYP2D6_3_xscore: -6.8882
CYP2D6_4_autodock: -5.62	CYP2D6_4_xscore: -6.94276
CYP2D6_5_autodock: -5.68	CYP2D6_5_xscore: -6.92912
CYP2D6_6_autodock: -5.43	CYP2D6_6_xscore: -7.27012
CYP2D6_7_autodock: -5.62	CYP2D6_7_xscore: -6.72452
CYP2D6_8_autodock: -5.58	CYP2D6_8_xscore: -6.45172
CYP2D6_9_autodock: -5.90	CYP2D6_9_xscore: -6.87456
CYP2D6_10_autodock: -5.87	CYP2D6_10_xscore: -6.69724
CYP2D6_11_autodock: -5.85	CYP2D6_11_xscore: -6.77908
CYP2D6_12_autodock: -6.10	CYP2D6_12_xscore: -6.91548
CYP2D6_13_autodock: -5.56	CYP2D6_13_xscore: -6.39716
CYP2D6_14_autodock: -5.53	CYP2D6_14_xscore: -6.94276
CYP2D6_15_autodock: -5.97	CYP2D6_15_xscore: -6.79272
CYP2D6_16_autodock: -5.77	CYP2D6_16_xscore: -6.84728
CYP2D6_17_autodock: -5.72	CYP2D6_17_xscore: -6.94276
CYP2D6_18_autodock: -5.92	CYP2D6_18_xscore: -6.87456
CYP2D6_19_autodock: -5.78	CYP2D6_19_xscore: -6.26076
CYP2D6_20_autodock: -5.64	CYP2D6_20_xscore: -6.53356

Ki or IC50 = 1000

Compound: quinuclidinol

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1
Num_AromaticRings: 0 Num_H_Acceptors: 1
Num_H_Donors: 2 Molecular_Weight: 128.19216
ALogP: -1.383 Num_Rotatable_Bonds: 1

CYP2D6_1_autodock: -6.31	CYP2D6_1_xscore: -6.43808
CYP2D6_2_autodock: -6.43	CYP2D6_2_xscore: -6.45172
CYP2D6_3_autodock: -6.43	CYP2D6_3_xscore: -6.3426
CYP2D6_4_autodock: -6.32	CYP2D6_4_xscore: -6.0698
CYP2D6_5_autodock: -6.31	CYP2D6_5_xscore: -6.60176

CYP2D6_6_autodock: -6.48	CYP2D6_6_xscore: -6.49264
CYP2D6_7_autodock: -6.26	CYP2D6_7_xscore: -6.36988
CYP2D6_8_autodock: -6.17	CYP2D6_8_xscore: -6.04252
CYP2D6_9_autodock: -6.18	CYP2D6_9_xscore: -6.43808
CYP2D6_10_autodock: -6.10	CYP2D6_10_xscore: -6.02888
CYP2D6_11_autodock: -6.41	CYP2D6_11_xscore: -6.56084
CYP2D6_12_autodock: -6.68	CYP2D6_12_xscore: -6.43808
CYP2D6_13_autodock: -6.00	CYP2D6_13_xscore: -6.23348
CYP2D6_14_autodock: -6.28	CYP2D6_14_xscore: -6.01524
CYP2D6_15_autodock: -6.55	CYP2D6_15_xscore: -6.35624
CYP2D6_16_autodock: -6.12	CYP2D6_16_xscore: -6.36988
CYP2D6_17_autodock: -6.20	CYP2D6_17_xscore: -6.49264
CYP2D6_18_autodock: -6.23	CYP2D6_18_xscore: -6.26076
CYP2D6_19_autodock: -6.07	CYP2D6_19_xscore: -6.0698
CYP2D6_20_autodock: -6.22	CYP2D6_20_xscore: -6.4108

Ki or IC50 = 1000

Compound: risperidone

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1
Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 3
Num_H_Donors: 1 Molecular_Weight: 411.49242
ALogP: 1.756 Num_Rotatable_Bonds: 13

CYP2D6_1_autodock: +2.90	CYP2D6_1_xscore: -9.45252
CYP2D6_2_autodock: +1.33	CYP2D6_2_xscore: -8.96148
CYP2D6_3_autodock: +90.75	CYP2D6_3_xscore: -8.36132
CYP2D6_4_autodock: +2.54	CYP2D6_4_xscore: -9.548
CYP2D6_5_autodock: +72.63	CYP2D6_5_xscore: -8.03396
CYP2D6_6_autodock: -0.18	CYP2D6_6_xscore: -8.866
CYP2D6_7_autodock: +10.10	CYP2D6_7_xscore: -8.97512
CYP2D6_8_autodock: +7.45	CYP2D6_8_xscore: -9.1388
CYP2D6_9_autodock: +2.47	CYP2D6_9_xscore: -9.08424
CYP2D6_10_autodock: +5.06	CYP2D6_10_xscore: -9.02968
CYP2D6_11_autodock: +4.99	CYP2D6_11_xscore: -9.2752
CYP2D6_12_autodock: +12.90	CYP2D6_12_xscore: -8.67504
CYP2D6_13_autodock: +25.02	CYP2D6_13_xscore: -8.26584
CYP2D6_14_autodock: -7.12	CYP2D6_14_xscore: -9.11152
CYP2D6_15_autodock: +1.54	CYP2D6_15_xscore: -9.19336
CYP2D6_16_autodock: +20.20	CYP2D6_16_xscore: -8.1158
CYP2D6_17_autodock: +11.63	CYP2D6_17_xscore: -8.42952
CYP2D6_18_autodock: +7.25	CYP2D6_18_xscore: -8.30676
CYP2D6_19_autodock: +0.98	CYP2D6_19_xscore: -9.4116
CYP2D6_20_autodock: +30.24	CYP2D6_20_xscore: -8.64776

Ki or IC50 = 54.43

Compound: sempervirine

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1

Num_AromaticRings: 3 Num_H_Acceptors: 0
Num_H_Donors: 1 Molecular_Weight: 277.38344
ALogP: 4.896 Num_Rotatable_Bonds: 0

CYP2D6_1_autodock: -10.15	CYP2D6_1_xscore: -8.14308
CYP2D6_2_autodock: -10.08	CYP2D6_2_xscore: -8.4568
CYP2D6_3_autodock: -9.72	CYP2D6_3_xscore: -8.37496
CYP2D6_4_autodock: -11.37	CYP2D6_4_xscore: -8.15672
CYP2D6_5_autodock: -10.06	CYP2D6_5_xscore: -8.92056
CYP2D6_6_autodock: -9.76	CYP2D6_6_xscore: -8.07488
CYP2D6_7_autodock: -10.46	CYP2D6_7_xscore: -8.26584
CYP2D6_8_autodock: -9.38	CYP2D6_8_xscore: -8.22492
CYP2D6_9_autodock: -10.70	CYP2D6_9_xscore: -7.96576
CYP2D6_10_autodock: -9.86	CYP2D6_10_xscore: -8.42952
CYP2D6_11_autodock: -11.77	CYP2D6_11_xscore: -8.41588
CYP2D6_12_autodock: -8.53	CYP2D6_12_xscore: -8.08852
CYP2D6_13_autodock: -9.48	CYP2D6_13_xscore: -8.30676
CYP2D6_14_autodock: -9.82	CYP2D6_14_xscore: -8.83872
CYP2D6_15_autodock: -9.18	CYP2D6_15_xscore: -8.37496
CYP2D6_16_autodock: -9.92	CYP2D6_16_xscore: -8.30676
CYP2D6_17_autodock: -9.20	CYP2D6_17_xscore: -8.26584
CYP2D6_18_autodock: -10.17	CYP2D6_18_xscore: -8.27948
CYP2D6_19_autodock: -12.38	CYP2D6_19_xscore: -8.03396
CYP2D6_20_autodock: -9.32	CYP2D6_20_xscore: -8.56592

Ki or IC50 = 9.7

Compound: serpentine

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1
Num_AromaticRings: 3 Num_H_Acceptors: 3
Num_H_Donors: 1 Molecular_Weight: 349.40304
ALogP: 3.126 Num_Rotatable_Bonds: 2

CYP2D6_1_autodock: -10.30	CYP2D6_1_xscore: -8.184
CYP2D6_2_autodock: -10.10	CYP2D6_2_xscore: -8.6614
CYP2D6_3_autodock: -7.99	CYP2D6_3_xscore: -8.1158
CYP2D6_4_autodock: -12.02	CYP2D6_4_xscore: -8.29312
CYP2D6_5_autodock: -6.99	CYP2D6_5_xscore: -7.89756
CYP2D6_6_autodock: -10.05	CYP2D6_6_xscore: -7.88392
CYP2D6_7_autodock: -9.95	CYP2D6_7_xscore: -8.3204
CYP2D6_8_autodock: -7.27	CYP2D6_8_xscore: -7.9794
CYP2D6_9_autodock: -10.84	CYP2D6_9_xscore: -7.96576
CYP2D6_10_autodock: -10.39	CYP2D6_10_xscore: -8.23856
CYP2D6_11_autodock: -10.67	CYP2D6_11_xscore: -8.29312
CYP2D6_12_autodock: -10.47	CYP2D6_12_xscore: -8.2522
CYP2D6_13_autodock: -10.98	CYP2D6_13_xscore: -8.15672
CYP2D6_14_autodock: -10.53	CYP2D6_14_xscore: -8.525
CYP2D6_15_autodock: -11.20	CYP2D6_15_xscore: -8.02032
CYP2D6_16_autodock: -10.52	CYP2D6_16_xscore: -8.42952

CYP2D6_17_autodock: -7.92 CYP2D6_17_xscore: -7.96576
CYP2D6_18_autodock: -10.27 CYP2D6_18_xscore: -8.07488
CYP2D6_19_autodock: -10.06 CYP2D6_19_xscore: -7.9794
CYP2D6_20_autodock: -6.73 CYP2D6_20_xscore: -8.0476
Ki or IC50 = 2.2

Compound: tetrahydroalstonine

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1
Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 3
Num_H_Donors: 2 Molecular_Weight: 353.4348
ALogP: 1.183 Num_Rotatable_Bonds: 2

CYP2D6_1_autodock: -11.69	CYP2D6_1_xscore: -8.7296
CYP2D6_2_autodock: -9.41	CYP2D6_2_xscore: -8.37496
CYP2D6_3_autodock: -8.71	CYP2D6_3_xscore: -8.22492
CYP2D6_4_autodock: -12.37	CYP2D6_4_xscore: -8.70232
CYP2D6_5_autodock: -7.04	CYP2D6_5_xscore: -7.89756
CYP2D6_6_autodock: -10.46	CYP2D6_6_xscore: -8.44316
CYP2D6_7_autodock: -10.62	CYP2D6_7_xscore: -8.89328
CYP2D6_8_autodock: -7.01	CYP2D6_8_xscore: -8.57956
CYP2D6_9_autodock: -11.76	CYP2D6_9_xscore: -8.4568
CYP2D6_10_autodock: -11.10	CYP2D6_10_xscore: -8.56592
CYP2D6_11_autodock: -10.17	CYP2D6_11_xscore: -8.87964
CYP2D6_12_autodock: -11.34	CYP2D6_12_xscore: -8.866
CYP2D6_13_autodock: -10.09	CYP2D6_13_xscore: -8.41588
CYP2D6_14_autodock: -10.82	CYP2D6_14_xscore: -8.67504
CYP2D6_15_autodock: -9.54	CYP2D6_15_xscore: -8.44316
CYP2D6_16_autodock: -10.66	CYP2D6_16_xscore: -8.71596
CYP2D6_17_autodock: -7.91	CYP2D6_17_xscore: -8.49772
CYP2D6_18_autodock: -8.60	CYP2D6_18_xscore: -8.30676
CYP2D6_19_autodock: -11.20	CYP2D6_19_xscore: -8.53864
CYP2D6_20_autodock: -9.23	CYP2D6_20_xscore: -8.71596

Ki or IC50 = 5.0

Compound: yohimbine

FormalCharge: 1 Num_PositiveAtoms: 1
Num_AromaticRings: 2 Num_H_Acceptors: 3
Num_H_Donors: 3 Molecular_Weight: 355.45068
ALogP: 1.261 Num_Rotatable_Bonds: 3

CYP2D6_1_autodock: -11.20	CYP2D6_1_xscore: -8.55228
CYP2D6_2_autodock: -10.15	CYP2D6_2_xscore: -8.60684
CYP2D6_3_autodock: -6.94	CYP2D6_3_xscore: -8.21128
CYP2D6_4_autodock: -11.91	CYP2D6_4_xscore: -8.525
CYP2D6_5_autodock: -5.96	CYP2D6_5_xscore: -8.36132
CYP2D6_6_autodock: -10.67	CYP2D6_6_xscore: -8.23856
CYP2D6_7_autodock: -9.17	CYP2D6_7_xscore: -8.184
CYP2D6_8_autodock: -8.13	CYP2D6_8_xscore: -8.3204

CYP2D6_9_autodock: -11.65	CYP2D6_9_xscore: -8.07488
CYP2D6_10_autodock: -11.31	CYP2D6_10_xscore: -8.87964
CYP2D6_11_autodock: -9.60	CYP2D6_11_xscore: -8.98876
CYP2D6_12_autodock: -10.14	CYP2D6_12_xscore: -8.63412
CYP2D6_13_autodock: -10.49	CYP2D6_13_xscore: -8.34768
CYP2D6_14_autodock: -9.79	CYP2D6_14_xscore: -8.85236
CYP2D6_15_autodock: -9.59	CYP2D6_15_xscore: -8.44316
CYP2D6_16_autodock: -9.13	CYP2D6_16_xscore: -8.21128
CYP2D6_17_autodock: -10.52	CYP2D6_17_xscore: -8.42952
CYP2D6_18_autodock: -8.74	CYP2D6_18_xscore: -8.07488
CYP2D6_19_autodock: -11.72	CYP2D6_19_xscore: -8.4568
CYP2D6_20_autodock: -5.38	CYP2D6_20_xscore: -8.2522

Ki or IC50 = 0.031