

Supplementary file 1

In silico study of dimethyltryptamine analogues against 5-HT_{1B} receptor: Molecular docking, dynamic simulations and ADMET prediction

Neyder Contreras-Puentes^{1,2*}, Antistio Alviz-Amador¹, Isabella Manzur Villalobos¹

¹Pharmacology and Therapeutics Research Group, University of Cartagena, Cartagena D.T y C., Colombia

²GINUMED, Rafael Nuñez University Corporation, Cartagena D.T y C., Colombia

Table S1. Molecular docking score (Kcal/mol) of DMT analogues bound to 5-HT_{1B} receptor

Ligand	Binding 1 (Kcal/mol)	Binding 2 (Kcal/mol)	Mean	SD
112814775	-9	-9,1	-9,05	0,07
122626322	-8,7	-8,6	-8,65	0,07
21599232	-8,4	-8,4	-8,40	0,00
44331763	-8,5	-8,1	-8,30	0,28
44331619	-8,5	-8	-8,25	0,35
50742505	-8,1	-8,3	-8,20	0,14
808535	-8,3	-8,1	-8,20	0,14
90983806	-8,1	-8,2	-8,15	0,07
44522084	-8	-8,2	-8,10	0,14
808537	-8	-8,2	-8,10	0,14
11097143	-8,1	-8	-8,05	0,07
16674492	-8	-8,1	-8,05	0,07
295667	-8,1	-8	-8,05	0,07
3055740	-8,2	-7,9	-8,05	0,21
44331706	-8,2	-7,8	-8,00	0,28
3055752	-7,9	-8	-7,95	0,07
51703	-7,8	-8,1	-7,95	0,21
135234678	-7,5	-8,3	-7,90	0,57
12565500	-7,9	-7,7	-7,80	0,14
152215	-7,7	-7,9	-7,80	0,14
5475583	-7,6	-7,9	-7,75	0,21
59120675	-7,9	-7,6	-7,75	0,21
85862883	-7,9	-7,5	-7,70	0,28

Supplementary file 1

14090369	-7,8	-7,6	-7,70	0,14
21763144	-7,6	-7,8	-7,70	0,14
92525977	-7,6	-7,7	-7,65	0,07
114987380	-8,1	-7,1	-7,60	0,71
129370270	-7,2	-7,9	-7,55	0,49
103093117	-7,6	-7,5	-7,55	0,07
129370271	-7,5	-7,6	-7,55	0,07
64462361	-7,6	-7,5	-7,55	0,07
82284569	-7,5	-7,6	-7,55	0,07
103093426	-7,5	-7,5	-7,50	0,00
12745501	-7,3	-7,7	-7,50	0,28
84118126	-7,4	-7,5	-7,45	0,07
103091890	-7,3	-7,6	-7,45	0,21
82473960	-7,3	-7,6	-7,45	0,21
83700104	-7,3	-7,6	-7,45	0,21
112510252	-7,6	-7,2	-7,40	0,28
82469752	-7,3	-7,5	-7,40	0,14
86213731	-7,2	-7,6	-7,40	0,28
102538500	-7,2	-7,5	-7,35	0,21
112742431	-7,5	-7,2	-7,35	0,21
137316524	-7,3	-7,4	-7,35	0,07
71590930	-7,3	-7,4	-7,35	0,07
4583109	-7,4	-7,2	-7,30	0,14
547562	-7,2	-7,4	-7,30	0,14
119084834	-7,5	-7,1	-7,30	0,28
124491879	-7,1	-7,5	-7,30	0,28
130443458	-7,5	-7,1	-7,30	0,28
45597	-7,5	-7,1	-7,30	0,28
56698518	-7,3	-7,3	-7,30	0,00
59768531	-7,1	-7,5	-7,30	0,28
82282290	-7,3	-7,3	-7,30	0,00
103092499	-6,9	-7,6	-7,25	0,49
130117299	-7,2	-7,3	-7,25	0,07
53494545	-7,4	-7,1	-7,25	0,21
83700101	-7,3	-7,2	-7,25	0,07
102293926	-7	-7,4	-7,20	0,28
103092803	-7,4	-7	-7,20	0,28
115134838	-7,2	-7,2	-7,20	0,00
124566723	-6,9	-7,5	-7,20	0,42
134963945	-7	-7,4	-7,20	0,28
135779158	-7	-7,4	-7,20	0,28
25194009	-7,2	-7,2	-7,20	0,00

Supplementary file 1

58088651	-6,9	-7,5	-7,20	0,42
58930533	-7,2	-7,2	-7,20	0,00
61323902	-7	-7,4	-7,20	0,28
64461411	-7,4	-7	-7,20	0,28
65918779	-7	-7,4	-7,20	0,28
70644510	-7	-7,4	-7,20	0,28
84117170	-7,2	-7,2	-7,20	0,00
85712935	-7	-7,4	-7,20	0,28
89305971	-7,2	-7,2	-7,20	0,00
53494543	-7,1	-7,3	-7,20	0,14
75355351	-7,3	-7,1	-7,20	0,14
82285015	-7,1	-7,3	-7,20	0,14
83697250	-7,3	-7,1	-7,20	0,14
102363411	-6,9	-7,4	-7,15	0,35
103092193	-6,9	-7,4	-7,15	0,35
11447529	-7	-7,3	-7,15	0,21
11507002	-6,9	-7,4	-7,15	0,35
115203474	-7,1	-7,2	-7,15	0,07
116930877	-7,2	-7,1	-7,15	0,07
124491880	-7,2	-7,1	-7,15	0,07
124566722	-7,1	-7,2	-7,15	0,07
12745506	-7	-7,3	-7,15	0,21
132094660	-7	-7,3	-7,15	0,21
137545140	-7,1	-7,2	-7,15	0,07
3275741	-7,2	-7,1	-7,15	0,07
53494546	-7,3	-7	-7,15	0,21
53494547	-7,3	-7	-7,15	0,21
65920436	-7,2	-7,1	-7,15	0,07
68046504	-7,3	-7	-7,15	0,21
71039073	-7	-7,3	-7,15	0,21
71169924	-7	-7,3	-7,15	0,21
82469753	-7,1	-7,2	-7,15	0,07
96657141	-7,2	-7,1	-7,15	0,07
112476979	-7	-7,2	-7,10	0,14
112742434	-7,1	-7,1	-7,10	0,00
114987379	-7	-7,2	-7,10	0,14
115200720	-7,1	-7,1	-7,10	0,00
116931190	-7	-7,2	-7,10	0,14
12297087	-7,2	-7	-7,10	0,14
126536885	-7,3	-6,9	-7,10	0,28
134388027	-6,9	-7,3	-7,10	0,28
15620748	-7,2	-7	-7,10	0,14

Supplementary file 1

27302	-7,2	-7	-7,10	0,14
38988541	-6,9	-7,3	-7,10	0,28
64463392	-7	-7,2	-7,10	0,14
65919393	-7	-7,2	-7,10	0,14
68748253	-7,3	-6,9	-7,10	0,28
82288268	-7	-7,2	-7,10	0,14
84752749	-7	-7,2	-7,10	0,14
96660117	-6,8	-7,4	-7,10	0,42
116931088	-7,2	-6,9	-7,05	0,21
133666203	-7,2	-6,9	-7,05	0,21
136453262	-6,7	-7,4	-7,05	0,49
21552228	-6,7	-7,4	-7,05	0,49
25193813	-6,9	-7,2	-7,05	0,21
26903	-6,9	-7,2	-7,05	0,21
45590	-6,9	-7,2	-7,05	0,21
5054730	-6,9	-7,2	-7,05	0,21
58980321	-6,9	-7,2	-7,05	0,21
102434670	-7,1	-7	-7,05	0,07
117567090	-7	-7,1	-7,05	0,07
11790574	-6,8	-7,3	-7,05	0,35
12388985	-7,3	-6,8	-7,05	0,35
134857556	-7	-7,1	-7,05	0,07
28646412	-6,8	-7,3	-7,05	0,35
44720794	-6,8	-7,3	-7,05	0,35
59968939	-7,1	-7	-7,05	0,07
64463389	-6,8	-7,3	-7,05	0,35
112477315	-6,8	-7,2	-7,00	0,28
115202838	-7	-7	-7,00	0,00
115203309	-7,1	-6,9	-7,00	0,14
115204106	-7	-7	-7,00	0,00
116905148	-7,2	-6,8	-7,00	0,28
117567002	-7,2	-6,8	-7,00	0,28
117795872	-6,8	-7,2	-7,00	0,28
12297086	-7	-7	-7,00	0,00
129393854	-6,9	-7,1	-7,00	0,14
129636960	-7,1	-6,9	-7,00	0,14
129719083	-6,9	-7,1	-7,00	0,14
137097322	-7,1	-6,9	-7,00	0,14
137388797	-6,6	-7,4	-7,00	0,57
20689247	-7	-7	-7,00	0,00
21552235	-6,8	-7,2	-7,00	0,28
57048604	-6,9	-7,1	-7,00	0,14

Supplementary file 1

59644496	-7,3	-6,7	-7,00	0,42
59895651	-6,9	-7,1	-7,00	0,14
728634	-6,9	-7,1	-7,00	0,14
83832097	-6,8	-7,2	-7,00	0,28
84125084	-6,9	-7,1	-7,00	0,14
96377473	-7	-7	-7,00	0,00
96625532	-6,9	-7,1	-7,00	0,14
104422982	-7	-6,9	-6,95	0,07
10846398	-6,9	-7	-6,95	0,07
115203941	-6,9	-7	-6,95	0,07
117040364	-6,9	-7	-6,95	0,07
132271716	-6,7	-7,2	-6,95	0,35
136593712	-7	-6,9	-6,95	0,07
25193811	-6,9	-7	-6,95	0,07
44719455	-6,9	-7	-6,95	0,07
4525689	-6,9	-7	-6,95	0,07
83704252	-6,9	-7	-6,95	0,07
927487	-6,9	-7	-6,95	0,07
115199648	-6,8	-7,1	-6,95	0,21
115206102	-6,8	-7,1	-6,95	0,21
27848	-7,1	-6,8	-6,95	0,21
28646377	-6,8	-7,1	-6,95	0,21
29935323	-6,8	-7,1	-6,95	0,21
44720793	-6,8	-7,1	-6,95	0,21
62324304	-7,1	-6,8	-6,95	0,21
68361221	-6,6	-7,3	-6,95	0,49
6929133	-6,8	-7,1	-6,95	0,21
82282541	-6,8	-7,1	-6,95	0,21
106179856	-6,9	-6,9	-6,90	0,00
10954003	-7	-6,8	-6,90	0,14
11117073	-6,8	-7	-6,90	0,14
122384406	-6,8	-7	-6,90	0,14
131420396	-7,1	-6,7	-6,90	0,28
136706171	-7,1	-6,7	-6,90	0,28
137320447	-7	-6,8	-6,90	0,14
18356986	-6,9	-6,9	-6,90	0,00
20723232	-6,8	-7	-6,90	0,14
21344225	-6,7	-7,1	-6,90	0,28
21552238	-6,8	-7	-6,90	0,14
24839585	-6,5	-7,3	-6,90	0,57
25193810	-7	-6,8	-6,90	0,14
28991	-7	-6,8	-6,90	0,14

Supplementary file 1

35874	-7	-6,8	-6,90	0,14
3724428	-6,8	-7	-6,90	0,14
43202430	-6,7	-7,1	-6,90	0,28
43202431	-6,7	-7,1	-6,90	0,28
46704173	-6,8	-7	-6,90	0,14
57076807	-6,8	-7	-6,90	0,14
6929134	-7	-6,8	-6,90	0,14
6954651	-6,8	-7	-6,90	0,14
6998870	-6,8	-7	-6,90	0,14
86042734	-6,9	-6,9	-6,90	0,00
93341896	-6,9	-6,9	-6,90	0,00
93341897	-6,9	-6,9	-6,90	0,00
96625533	-6,9	-6,9	-6,90	0,00
104422620	-6,9	-6,8	-6,85	0,07
11424446	-6,9	-6,8	-6,85	0,07
115202673	-6,7	-7	-6,85	0,21
12297085	-6,8	-6,9	-6,85	0,07
136970004	-7	-6,7	-6,85	0,21
137300614	-6,8	-6,9	-6,85	0,07
20976964	-6,7	-7	-6,85	0,21
21043784	-6,7	-7	-6,85	0,21
25194007	-6,6	-7,1	-6,85	0,35
39450	-7	-6,7	-6,85	0,21
420560	-7,3	-6,4	-6,85	0,64
4527008	-6,6	-7,1	-6,85	0,35
45605	-6,7	-7	-6,85	0,21
52547	-6,9	-6,8	-6,85	0,07
53494544	-6,9	-6,8	-6,85	0,07
57161443	-6,7	-7	-6,85	0,21
6092	-6,8	-6,9	-6,85	0,07
6954650	-6,7	-7	-6,85	0,21
79646870	-6,7	-7	-6,85	0,21
82085940	-7	-6,7	-6,85	0,21
115199416	-6,7	-6,9	-6,80	0,14
116905588	-6,9	-6,7	-6,80	0,14
117044024	-6,7	-6,9	-6,80	0,14
117566584	-6,7	-6,9	-6,80	0,14
6090	-6,7	-6,9	-6,80	0,14
6091	-6,9	-6,7	-6,80	0,14
6947435	-6,7	-6,9	-6,80	0,14
82093563	-6,7	-6,9	-6,80	0,14
115201929	-6,8	-6,8	-6,80	0,00

Supplementary file 1

130120148	-6,8	-6,8	-6,80	0,00
134080494	-6,8	-6,8	-6,80	0,00
1778795	-6,5	-7,1	-6,80	0,42
1778796	-6,5	-7,1	-6,80	0,42
20231953	-6,8	-6,8	-6,80	0,00
21552249	-6,6	-7	-6,80	0,28
24839494	-6,8	-6,8	-6,80	0,00
24839509	-6,5	-7,1	-6,80	0,42
24839550	-6,8	-6,8	-6,80	0,00
25193812	-6,8	-6,8	-6,80	0,00
35872	-6,6	-7	-6,80	0,28
45586	-6,6	-7	-6,80	0,28
52906	-6,6	-7	-6,80	0,28
96231597	-6,8	-6,8	-6,80	0,00
112510251	-6,9	-6,6	-6,75	0,21
11401216	-6,9	-6,6	-6,75	0,21
115198632	-6,8	-6,7	-6,75	0,07
115202205	-6,7	-6,8	-6,75	0,07
116905267	-6,6	-6,9	-6,75	0,21
116931826	-6,6	-6,9	-6,75	0,21
12297084	-6,6	-6,9	-6,75	0,21
123147860	-6,8	-6,7	-6,75	0,07
20524091	-6,7	-6,8	-6,75	0,07
21472501	-6,7	-6,8	-6,75	0,07
25193814	-7	-6,5	-6,75	0,35
25194008	-6,8	-6,7	-6,75	0,07
4194764	-6,7	-6,8	-6,75	0,07
44719457	-6,9	-6,6	-6,75	0,21
44720788	-6,6	-6,9	-6,75	0,21
57464898	-6,8	-6,7	-6,75	0,07
6943957	-6,8	-6,7	-6,75	0,07
728636	-6,7	-6,8	-6,75	0,07
927486	-6,5	-7	-6,75	0,35
93707161	-6,7	-6,8	-6,75	0,07
115201306	-6,7	-6,7	-6,70	0,00
116904821	-6,9	-6,5	-6,70	0,28
123304207	-6,7	-6,7	-6,70	0,00
17843698	-6,5	-6,9	-6,70	0,28
2305232	-7	-6,4	-6,70	0,42
5316904	-6,7	-6,7	-6,70	0,00
60663137	-6,9	-6,5	-6,70	0,28
70612025	-6,7	-6,7	-6,70	0,00

Supplementary file 1

96377478	-6,7	-6,7	-6,70	0,00
129787487	-6,6	-6,8	-6,70	0,14
4450541	-6,6	-6,8	-6,70	0,14
451062	-6,8	-6,6	-6,70	0,14
451088	-6,6	-6,8	-6,70	0,14
54694712	-6,8	-6,6	-6,70	0,14
57567651	-6,8	-6,6	-6,70	0,14
60663234	-6,8	-6,6	-6,70	0,14
62325775	-6,8	-6,6	-6,70	0,14
66852690	-6,8	-6,6	-6,70	0,14
71750654	-6,8	-6,6	-6,70	0,14
82115889	-6,6	-6,8	-6,70	0,14
94257400	-6,6	-6,8	-6,70	0,14
10036521	-6,4	-6,9	-6,65	0,35
10241628	-6,5	-6,8	-6,65	0,21
115198103	-6,6	-6,7	-6,65	0,07
115251575	-6,3	-7	-6,65	0,49
116032069	-6,6	-6,7	-6,65	0,07
118478788	-6,6	-6,7	-6,65	0,07
15360907	-6,4	-6,9	-6,65	0,35
20723233	-6,5	-6,8	-6,65	0,21
24278632	-6,6	-6,7	-6,65	0,07
25194006	-6,6	-6,7	-6,65	0,07
3453787	-6,6	-6,7	-6,65	0,07
43130215	-6,5	-6,8	-6,65	0,21
6089	-6,6	-6,7	-6,65	0,07
824845	-6,5	-6,8	-6,65	0,21
94266366	-6,8	-6,5	-6,65	0,21
10081512	-6,5	-6,7	-6,60	0,14
15723575	-6,4	-6,8	-6,60	0,28
15851966	-6,7	-6,5	-6,60	0,14
20270104	-6,5	-6,7	-6,60	0,14
23336456	-6,3	-6,9	-6,60	0,42
25194005	-6,6	-6,6	-6,60	0,00
101573897	-6,4	-6,7	-6,55	0,21
12244274	-6,4	-6,7	-6,55	0,21
45582	-6,4	-6,7	-6,55	0,21
71378332	-6,4	-6,7	-6,55	0,21
115202040	-6,6	-6,5	-6,55	0,07
1711924	-6,5	-6,6	-6,55	0,07
52549	-6,5	-6,6	-6,55	0,07
6890	-6,8	-6,3	-6,55	0,35

Supplementary file 1

74405184	-6,3	-6,8	-6,55	0,35
11030579	-6,5	-6,5	-6,50	0,00
115259436	-6,3	-6,7	-6,50	0,28
129719058	-6,2	-6,8	-6,50	0,42
24278605	-6,4	-6,6	-6,50	0,14
5202	-6,4	-6,6	-6,50	0,14
714712	-6,3	-6,7	-6,50	0,28
74405270	-6,4	-6,6	-6,50	0,14
80397080	-6,4	-6,6	-6,50	0,14
55021147	-6,4	-6,5	-6,45	0,07
1150	-6,6	-6,3	-6,45	0,21
11030895	-6,2	-6,5	-6,35	0,21
57567646	-6,2	-6,5	-6,35	0,21
6736	-6,6	-6,1	-6,35	0,35
409902	-6,1	-6,5	-6,30	0,28
ERGOTAMINE	-14	-13,9	-13,95	0,07