

Table S1. Fragment library used in the present study.

Aromatic fragment	Type	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ⁶	R ⁷
Ar1	a	H	H	H	H	H	H	H
	b	H	H	H	Cl	H	H	H
	c	Cl	Cl	H	H	H	H	H
	d	CH ₃	H	H	H	H	H	H
	e	H	F	H	H	H	H	H
	f	H	H	H	H	H	Cl	H
	g	Cl	F	H	H	H	H	H
	h	H	H	H	CH ₃	H	H	H
	i	H	H	H	F	H	H	H
	j	H	H	Br	H	H	H	H
	k	H	Br	H	H	H	H	H
	l	H	H	H	OCH ₃	H	H	H
	m	H	H	H	H	H	H	F
	n	H	H	H	H	H	F	H
	o	H	H	H	H	F	H	H
	p	F	H	H	H	H	H	H
Ar2	a	H	H	H	H	-	-	-
	b	NH ₂	H	H	H	-	-	-
	c	H	NH ₂	H	H	-	-	-
	d	CH ₃	H	H	H	-	-	-
	e	H	CH ₃	H	H	-	-	-
	f	H	H	CH ₃	H	-	-	-
	g	H	H	H	CH ₃	-	-	-
	h	F	H	H	H	-	-	-
	i	H	F	H	H	-	-	-
	j	H	H	F	H	-	-	-
	k	H	H	H	F	-	-	-
	l	Cl	H	H	H	-	-	-
	m	H	Cl	H	H	-	-	-
	n	H	H	Cl	H	-	-	-
	o	H	H	H	Cl	-	-	-
	p	Br	H	H	H	-	-	-
	q	H	Br	H	H	-	-	-
	r	H	H	Br	H	-	-	-
	s	H	H	H	Br	-	-	-
	t	H	OCH ₃	H	H	-	-	-
	u	H	H	OCH ₃	H	-	-	-
v	OCH ₃	H	H	H	-	-	-	
Ar3	a	H	H	H	H	H	-	-
	b	CH ₃	H	H	H	H	-	-
	c	H	CH ₃	H	H	H	-	-
	d	H	F	H	H	H	-	-

	e	H	H	H	Br	H	-	-
	f	H	CH ₃	H	Br	H	-	-
	g	H	H	Br	H	H	-	-
	h	H	H	H	OCH ₃	H	-	-
	i	H	H	H	OCH ₃	OCH ₃	-	-
Ar4	a	H	H	H	-	-	-	-
	b	H	H	Br	-	-	-	-
	c	H	H	CH ₃	-	-	-	-
	d	CH ₃	H	H	-	-	-	-
	e	H	Br	H	-	-	-	-
	f	H	CH ₃	CH ₃	-	-	-	-
	g	H	H	OCH ₃	-	-	-	-
	h	H	H	Cl	-	-	-	-
	i	H	OCH ₃	OCH ₃	-	-	-	-
	j	<i>i</i> C ₃ H ₇	H	H	-	-	-	-
	k	CHF ₂	H	H	-	-	-	-
	l	H	Cl	Cl	-	-	-	-
	m	H	Cl	H	-	-	-	-
	n	H	OCH ₃	H	-	-	-	-
o	H	CH ₃	H	-	-	-	-	
Ar5	a	H	-	-	-	-	-	-
	b	Br	-	-	-	-	-	-
Ar6	a	H	-	-	-	-	-	-
	b	Br	-	-	-	-	-	-
Ar7	a	H	H	-	-	-	-	-
	b	Br	H	-	-	-	-	-
	c	H	Br	-	-	-	-	-
Ar8	a	H	H	H	H	-	-	-
	b	F	H	H	H	-	-	-
	c	H	F	H	H	-	-	-
	d	H	H	F	H	-	-	-
	e	CH ₃	H	H	H	-	-	-
	f	Cl	H	H	H	-	-	-
	g	H	Cl	H	H	-	-	-
	h	H	H	Cl	H	-	-	-
	i	H	Br	H	H	-	-	-
	j	H	H	Br	H	-	-	-
	k	H	OCH ₃	H	H	-	-	-
	l	H	H	OCH ₃	H	-	-	-
	m	H	F	H	F	-	-	-
	n	H	C-R ² = N	H	H	-	-	-
Ar9	a	H	H	H	H	-	-	-
	b	H	Br	H	H	-	-	-
	c	H	H	Br	H	-	-	-
	d	Cl	H	H	H	-	-	-
	e	H	H	Cl	H	-	-	-

	f	H	F	H	H	-	-	-
	g	H	H	F	H	-	-	-
	h	CH ₃	H	H	H	-	-	-
	i	H	CH ₃	H	H	-	-	-
	j	OCH ₃	H	H	H	-	-	-
	k	H	OCH ₃	H	H	-	-	-
	l	H	H	H	F	-	-	-
	m	H	H	H	Br	-	-	-
	n	H	H	H	OCH ₃	-	-	-
	o	H	H	H	CH ₃	-	-	-
	p	H	H	OCH ₃	H	-	-	-
	q	H	H	CH ₃	H	-	-	-
Ar10	a	OCH ₃	H	-	-	-	-	-
	b	H	OCH ₃	-	-	-	-	-
	c	OCH ₃	OCH ₃	-	-	-	-	-
	d	F	H	-	-	-	-	-
	e	H	F	-	-	-	-	-
	f	Br	H	-	-	-	-	-
	g	H	Br	-	-	-	-	-
	h	H	SO ₂ NH ₂	-	-	-	-	-
	i	H	NHSO ₂ CH ₃	-	-	-	-	-
	j	H	NHSO ₂ NH ₂	-	-	-	-	-
	k	Cl	H	-	-	-	-	-
l	H	Cl	-	-	-	-	-	
m	Cl	Cl	-	-	-	-	-	
Ar11	a	H	-	-	-	-	-	-
	b	CH ₃	-	-	-	-	-	-