

Table S1: Data set of the pairs of evaluated proteins

Ligand	PDBid of the pair of proteins evaluated	Amount Of PDBs	Pairs Tested
Acarbose (ACR)	1esw/3bc9 ; 1gah/3jyr ; 1k1y/3jzj ; 1kxh/3k8m ; 1lf9/3top ; 1mxd/3w37 ; 1mxg/3wel ; 2f6d/3wen ; 2owc/3weo ; 2qmj/4uac	26	13
Benzamidine (BEN)	1bit/3b3j ; 1bty/3bg8 ; 1cc7/3gy7 ; 1cc8/3i78 ; 1ce5/3iti ; 1dpo/3m7o ; 1eax/3mfj ; 1h4w/3mi4 ; 1j14/3nq8 ; 1j15/3nqv ; 1j16/3p8g ; 1j8a/3plb ; 1l2e/3ptb ; 1lo6/3pwb ; 1lpu/3qk1 ; 1lr4/3rx ; 1mbq/3rxq ; 1nsa/3rxu ; 1oss/3rxv ; 1s0r/3t25 ; 1wri/3t26 ; 1zhm/3t27 ; 1zhp/3t28 ; 1zhr/3t29 ; 2aiq/3tay ; 2ayw/3tpk ; 2blv/3unq ; 2blw/3unr ; 2bmrv/3uy9 ; 2ckr/3zsn ; 2cks/4dso ; 2eek/4e2k ; 2j9n/4edg ; 2o8u/4edk ; 2oq5/4edr ; 2oxs/4edt ; 2tbs/4edv ; 2tio/4ee1 ; 2trm/4emn ; 2y46/4eqm ; 2y5z/4i8g ; 2y8d/4i8h ; 2zpq/4i8j ; 2zpr/4i8k ; 2zps/4i8l ; 3atl/4ixu ; 3b3j/4jpu ; 3bg8/4n8z ; 3gy7/4ncy ; 3i78/4nfe ; 3iti/4nvc	102	51
Adenosine triphosphate (ATP)	1a0i/3tuv ; 1ayl/3tw3 ; 1b38/3v01 ; 1b39/3v04 ; 1d9z/3vez ; 1dv2/3vnq ; 1dy3/3vvh ; 1e8x/3w1g ; 1fmw/3w5o ; 1gol/3whk ; 1hck/3wqu ; 1hi1/3wt0 ; 1hp1/3wv9 ; 1ii0/3zcn ; 1ijj/4a06 ; 1j09/4a07 ; 1j7k/4a2a ; 1ji0/4a6x ; 1jjv/4an3 ; 1jkn/4aw0 ; 1kax/4aw1 ; 1kay/4azw ; 1kaz/4b0s ; 1mb9/4b9q ; 1mo8/4beb ; 1n75/4bec ; 1nge/4ct1 ; 1ngf/4ct2 ; 1ngg/4dth ; 1ngh/4dtl ; 1obd/4dx2 ; 1ol6/4dxi ; 1os1/4ed4 ; 1phk/4edg ; 1q97/4ej7 ; 1qhg/4ffl ; 1qz5/4ffm ; 1qz6/4ffn ; 1r0x/4ffo ; 1r0z/4ffr ; 1r10/4fg7 ; 1s22/4fg8 ; 1tqp/4fg9 ; 1u5r/4fhx ; 1ua2/4fi1 ; 1uev/4fo0 ; 1vc9/4fut ; 1vjc/4fvq ; 1vjd/4fvr ; 1wua/4gni ; 1xdn/4gt3 ; 1xf9/4gxq ; 1xfa/4gxr ; 1xmj/4hdh ; 1xsc/4ife ; 1yfr/4itm ; 1ytm/4k41 ; 1yun/4lya ; 1zao/4mwh ; 1zp9/4n1a ; 2aru/4nh0 ; 2asm/4o4d ; 2aso/4o4e ; 2asp/4o4f ; 2b6f/4oab ; 2bbo/4ohw ; 2bbs/4pl7 ; 2bbt/4pla ; 2biy/4qdi ; 2bup/4qf5 ; 2c8v/4qnr ; 2c96/4rh7 ; 2c9c/4rqk ; 2cbz/4rqv ; 2faq/4rrv ; 2fgj/4rv7 ; 2fgk/4ttq ; 2fxu/4u0m ; 2gwj/4wae ; 2hf4/4wb6 ; 2hix/4wc0 ; 2hs0/4wh3 ; 2ijm/4wzy ; 2ily/3g59 ; 2ivp/3h1q ; 2ixg/3hav ; 2iyw/3hbt ; 2jk8/3hmn ; 2pzf/3mmv ; 2pzg/3mn6 ; 2q0d/3mn9 ; 2q0r/3nh9 ; 2q0u/3o8l ; 2qb8/3os3 ; 2qk4/3pgk ; 2r9v/3pp1 ; 2rsf/3q53 ; 2vcp/3q60 ; 2vyp/3qb0 ; 2w00/3qx9 ; 2w02/3r1r ; 2w5g/3si7 ; 2w5i/3sl2 ; 2x15/3t0z ; 2ych/3t54 ; 2yw2/3t8o ; 2zan/3tut ; 3a7h/3dnt ; 3a8t/3dy7 ; 3a8w/3e8n ; 3ar4/3efs ; 3att/3ehg ; 3bu5/3eks ; 3c5e/3eku ; 3cyi/3el2 ; 3dgl/3eps ; 3dkc/3fcc	234	117

