

Table S2 The letter form of the fingerprints demonstrate the interaction between the 66 inhibitors and amino acid residue in binding site of the CDK2

entry	molecule	10	13	18	33	81	82	83	85	86	89	131	145
1	1HCK	--	a	R	AAII	dd	--	--a-	-	DD-----	--	d-	--
2	1PXi	--	-	-	AA--	dd	--	--a-	-	-----	--	--	--
3	1PXJ	--	-	-	A---	dd	--	--a-	-	-----	--	--	--
4	1PXN	-R	-	-	----	d-	--	ddaa	-	-----	--	--	--
5	1PXO	--	-	-	----	dd	--	ddaa	-	-----	--	--	--
6	1PXP	C-	-	R	----	d-	--	ddaa	-	-----	--	DD	--
7	2A0C	C-	-	-	----	dd	--	ddaa	-	-----	--	--	--
8	2B53	--	-	-	----	--	--	----	R	D-----	--	--	--
9	3PXY	-R	-	-	----	--	--	dd--	-	-----	--	--	--
10	3PY0	--	-	R	----	dd	--	--a-	-	-----	--	--	--
11	3QL8	--	-	-	----	d-	--	dd--	-	-----	--	--	--
12	3QQF	--	-	-	----	dd	--	d-aa	-	-----	--	--	--
13	3QQG	--	-	-	----	--	--	dda-	-	-----	--	D-	--
14	3QQH	-R	-	-	----	--	--	ddaa	-	-----	--	D-	--
15	3QQJ	--	-	-	----	--	--	dda-	-	-----	--	--	--
16	3QQK	--	-	-	----	dd	--	ddaa	-	-----	--	--	--
17	3QQL	--	-	-	----	dd	--	d-aa	-	-----	--	--	--
18	3QRT	--	-	-	----	dd	--	ddaa	-	DDaa----	--	--	--
19	3QTU	--	a	-	----	dd	-R	--a-	-	DDaa----	--	--	DD
20	3QTW	-R	-	-	AA--	dd	--	ddaa	-	-----	--	--	--
21	3QTX	--	a	-	----	dd	--	dda-	-	DDaa----	--	--	--
22	3QTZ	--	-	-	----	dd	-R	d-aa	-	DDaa----	--	--	--
23	3QU0	--	-	-	AA--	dd	--	d-aa	-	DDaa----	--	--	--
24	3QWJ	--	-	-	----	dd	--	d-aa	-	-----	--	--	--
25	3QWK	--	-	-	AA--	dd	--	d-aa	-	-----	--	--	--
26	3QX2	-R	-	-	----	dd	--	d-aa	-	D-----	AA	--	--
27	3QX4	--	-	-	----	dd	a-	d-aa	-	-----	--	--	--
28	3QX0	-R	-	-	----	dd	--	d-aa	-	-----	--	--	--
29	3QXP	--	-	-	----	dd	-R	--a-	-	DDaa----	--	--	--
30	3QZF	--	-	-	----	--	--	dd--	-	D---II-	--	--	--
31	3QZG	-R	-	-	----	--	--	ddaa	-	-----	--	--	--
32	3QZH	--	-	-	----	dd	--	d-aa	-	-----	--	--	--
33	3QZI	--	-	-	----	dd	--	d-aa	-	-----	--	--	--
34	3R1Q	--	-	-	----	dd	--	d-aa	-	-----	--	--	--
35	3R1S	--	-	-	----	dd	--	d-aa	-	-----	--	--	--
36	3R1Y	--	-	-	----	dd	--	d-aa	-	-----	--	--	--
37	3R28	--	-	-	----	dd	--	d-aa	-	-----	--	--	--
38	3R6X	--	-	-	----	dd	--	d-aa	-	-----	C	--	--
39	3R71	--	-	-	A---	dd	--	--a-	-	D----C	--	-C	--
40	3R73	--	-	-	----	dd	--	d-aa	-	-----	C	--	--
41	3R7E	--	-	-	----	dd	--	d-aa	-	-----	--	--	--
42	3R7V	--	-	-	----	dd	--	ddaa	-	-----	--	--	--
43	3R7Y	--	-	-	----	dd	--	d-aa	-	D-----	AA	-C	--
44	3R83	--	-	-	----	dd	--	d-aa	-	D-----	A-	--	--
45	3R8L	--	-	-	----	dd	-R	--a-	-	-----	--	--	--
46	3R8P	--	-	-	----	--	--	ddaa	-	-----	--	--	--
47	3R8U	--	-	-	AA--	dd	--	ddaa	-	-----	--	--	--
48	3R8V	--	-	-	AA--	dd	--	ddaa	-	-----	--	--	--
49	3R9D	--	-	-	----	dd	--	ddaa	-	DDaa--C	--	--	--
50	3R9H	--	-	-	----	--	--	ddaa	-	DDaa--C	--	--	--
51	3RAI	--	-	-	----	dd	--	d-aa	-	DD--IIC	--	--	--
52	3RJC	--	-	-	----	dd	--	ddaa	-	-----	--	--	--
53	3RK5	--	-	-	AA--	dd	--	ddaa	R	-----	A-	--	--
54	3RK7	--	-	-	A---	dd	--	ddaa	-	-----	--	--	--
55	3RK9	--	-	-	AA--	dd	--	d-aa	-	-----	--	--	--
56	3RKB	-R	-	-	----	dd	--	ddaa	-	-----	--	--	--
57	3RM7	C-	-	-	AA--	dd	--	d-aa	-	-----	--	--	--
58	3RNI	-R	-	-	----	dd	--	ddaa	-	-----	--	--	--
59	3ROY	C-	-	-	----	dd	--	d-aa	-	-----	C	--	--
60	3RPO	-R	-	-	A---	dd	--	d-aa	-	D-----	--	--	--
61	3RPV	--	-	-	----	dd	--	d-aa	-	DDaa--C	--	d-	--
62	3S00	--	-	-	AA--	dd	--	ddaa	-	-----	--	--	--
63	3UNJ	--	-	-	----	--	--	ddaa	R	-----	AA	--	--
64	4EZ3	--	-	-	----	dd	--	--a-	-	--aa---	A-	--	--
65	4FKU	--	-	R	AAII	dd	a-	--a-	-	D-aa---	A-	--	--
66	5ANE	--	-	-	AA--	dd	--	--a-	-	-----	--	--	--