

Supplement

Virtual Screening and Biochemical Testing of Borocycles as Immunoproteasome Inhibitors

Levente Kollár¹, György Gábor Ferenczy¹, Matic Proj², Martina Gobec², Stanislav Gobec², Izidor Sosič², György Miklós Keserű^{1*}

¹ Medicinal Chemistry Research Group, Research Centre for Natural Sciences, H-1117 Budapest, 2 Magyar tudósok krt., Hungary

² Faculty of Pharmacy, University of Ljubljana, SI-1000 Ljubljana, 7 Aškerčeva cesta, Slovenia

* Corresponding author, e-mail: keseru.gyorgy@ttk.hu

Table S1 Smiles of 5-membered borocycles subjected to covalent virtual screening

<chem>OB1OCc2ccccc12</chem>
<chem>OB1OCc2cnccc12</chem>
<chem>OB1OCc2enccc12</chem>
<chem>Cc1ccc2COB(O)c2c1</chem>
<chem>Cc1ccc2B(O)OCc2c1</chem>
<chem>Cc1cccc2B(O)OCc12</chem>
<chem>Cc1cccc2COB(O)c12</chem>
<chem>CC1OB(O)c2ccccc12</chem>
<chem>OB1OC(=O)c2ncccc12</chem>
<chem>Nc1ccc2COB(O)c2c1</chem>
<chem>Nc1ccc2B(O)OCc2c1</chem>
<chem>Nc1cccc2COB(O)c12</chem>
<chem>Nc1cccc2B(O)OCc12</chem>
<chem>CC1OB(O)c2ccccc12</chem>
<chem>OB1OCc2ccc(O)cc12</chem>
<chem>OB1OCc2c1ccccc2O</chem>
<chem>OB1OCc2cc(O)ccc12</chem>
<chem>OB1OC=C2C=CC(O)=CC12</chem>
<chem>OB1OCc2ccc(F)cc12</chem>
<chem>OB1OCc2cc(F)ccc12</chem>
<chem>OB1OCc2c1ccccc2F</chem>
<chem>OB1OCc2ccccc(F)c12</chem>
<chem>[2H]C1([2H])OB(O)c2ccc(F)cc12</chem>
<chem>OB1OCc2cc(ccc12)C#N</chem>
<chem>OB1OCc2ccc(cc12)C#N</chem>
<chem>OB1OCc2ccccc(C#N)c12</chem>
<chem>OB1OC(C=C)c2ccccc12</chem>
<chem>OB1OC2(CC2)c2ccccc12</chem>
<chem>OB1OCc2ccc(C=C)cc12</chem>
<chem>OB1OCc2ccccc(C=O)c12</chem>
<chem>OB1OCc2ccc(C=O)cc12</chem>
<chem>CC1(C)OB(O)c2ccccc12</chem>
<chem>Cc1ccc2B(O)OCc2c1N</chem>
<chem>Cc1cc2B(O)OCc2cc1N</chem>

Cc1c2COB(O)c2ccc1N
NCC1OB(O)c2cccc12
CC1(C)OB(O)c2ccnc12
NCc1ccc2B(O)OCc2c1
COc1ccc2B(O)OCc2c1
COc1cccc2COB(O)c12
COc1ccc2COB(O)c2c1
Cc1c2B(O)OCc2ccc1O
OCc1cccc2B(O)OCc12
OCc1ccc2COB(O)c2c1
OCc1ccc2B(O)OCc2c1
OCc1cccc2COB(O)c12
Cc1ccc(F)c2COB(O)c12
Cc1cc(F)cc2COB(O)c12
OB1OCc2ccc(S)cc12
Nc1cc2B(O)OCc2cc1F
OB1OCc2cc(Cl)ccc12
OB1OCc2ccc(Cl)cc12
OB1OCc2c1cccc2Cl
OB1OCc2cc(F)c(F)cc12
OB1OCc2c1ccc(F)c2F
Cl.OB1OCC2=C1CNCC2
Cl.OB1OCC2=C1CCNC2
Cc1ccc2B(O)OC(C)(C)c2c1
Cc1ccc2c(c1)B(O)OC2(C)C
CC1(C)OB(O)c2cc(N)ccc12
CNCC1OB(O)c2cccc12
OB1OCc2ccc(cc12)C(O)=O
OB1OCc2cc(ccc12)C(O)=O
OB1OCc2cc3OCOc3cc12
OB1OCc2cccc(C(O)=O)c12
COc1cc(C)cc2COB(O)c12
OCCC1OB(O)c2cccc12
COc1ccc2C(C)OB(O)c2c1
CCOc1ccc2COB(O)c2c1
OB1OCc2ccc(cc12)[N+](=[O-])=O
OB1OCc2cccc(c12)[N+](=[O-])=O
OB1OCc2c1cccc2[N+](=[O-])=O
COc1ccc2B(O)OCc2c1N
COc1cc2B(O)OCc2c(N)c1
CC1(C)OB(O)c2ccc(F)cc12
CC1(C)OB(O)c2cc(F)ccc12
OCc1cc2B(O)OCc2cc1F
Cc1cc2B(O)OCc2cc1Cl
Cc1ccc2B(O)OCc2c1Cl
Cc1ccc(Cl)c2COB(O)c12
OB1OCc2ccc3cccc3c12
Cl.Nc1ccc2COB(O)c2c1
OB1OCc2cc(Cl)cc(F)c12
OB1OCc2cc(Cl)c(F)cc12
OB1OCc2c1ccc(Cl)c2F

OBIOCe2c1cc(F)c(F)c2F
OBIOC(CNC#N)c2ccccc12
CC1(C)OB(O)c2ccc(C=O)cc12
CC1(C)OB(O)c2cc(C=O)ccc12
CC(=O)Nc1ccc2COB(O)c2c1
CC1(C)OB(O)c2cc(CN)ccc12
OBIOC(CC(O)=O)c2ccccc12
COC(=O)c1ccc2COB(O)c2c1
OBIOCe2cc3OCCOc3cc12
COC(=O)c1ccc2COB(O)c12
OBIOCe2cccc(CC(O)=O)c12
Cc1c2B(O)OCc2ccc1C(O)=O
CC(C)Oc1ccc2COB(O)c2c1
OCCCc1ccc2COB(O)c12
CN(C)c1c2B(O)OCc2ccc1N
COc1cc2COB(O)c2cc1OC
COc1cc2B(O)OCc2c(OC)c1
CCSc1ccc2COB(O)c2c1
CCNc1cc2B(O)OCc2cc1F
Cl.NCC1OB(O)c2ccccc12
Cl.NCc1ccc2B(O)OCc2c1
OBIOCe2cc(OC(F)F)ccc12
OBIOCe2cc(ccc12)C(F)F
Cc1ccc2c(c1)B(O)OC21CCCC1
CNCc1ccc2c(c1)B(O)OC2(C)C
OBIOCe2cccc(CCC(O)=O)c12
CC1(C)OB(O)c2ccc(cc12)C(O)=O
CC1(C)OB(O)c2cc(ccc12)C(O)=O
CC1(C)OB(O)c2cc(ccc12)[N+][O-]=O
CCOc1ccc2C(CN)OB(O)c12
OBIOC(c2ccccc12)c1ccccc1
CS(=O)(=O)c1ccc2B(O)OCc2c1
OBIOCe2c1ccc2CBr
NS(=O)(=O)c1ccc2B(O)OCc2c1
Cl.CNCc1ccc2B(O)OCc12
O.Cl.NCC1OB(O)c2ccccc12
NCC1OB(O)c2c1ccc2OC1CC1
CC(C)(C)Sc1ccc2COB(O)c2c1
OBIOCe2cc(F)cc(CCC(O)=O)c12
CCS(=O)(=O)c1ccc2B(O)OCc2c1
OBIOCe2c1ccc2CBr
OBIOCe2cccc(CBr)c12
Cl.CC1(C)OB(O)c2cc(CN)ccc12
NS(=O)(=O)c1cc2COB(O)c2cc1F
OBIOCe2ccc(cc12)S(Cl)=O
NC[C@H]1OB(O)c2c1ccc2OCCCCO
NCC1OB(O)c2c1ccc2OCCCCO
OBIOCe2c1ccc2OCc1ccccc1
OBIOCe2cc(OCc3ccccc3)ccc12
OBIOCe2cc(Cl)cc(CCC(O)=O)c12
OBIOCe2ccc(Cl)c(CCC(O)=O)c12

CN(C)S(=O)(=O)c1ccc2B(O)OCc2c1
CN(C)S(=O)(=O)c1ccc2COB(O)c2c1
CC(C)(C)OC(=O)Nc1ccc2COB(O)c2c1
CCOC(=O)C=Cc1cc(F)cc2COB(O)c12
OBIOCe2cc(Oc3ccc(cc3)C#N)ccc12
OBIOCe2cc(Oc3ccc(en3)C#N)ccc12
OBIOCe2cc(ccc12)S(=O)(=O)NC1CC1
CC1(C)OB(O)c2ccc(CBr)cc12
[2H]c1c([2H])c(C#N)c([2H])c([2H])c1Oe1ccc2B(O)OCc2c1
OBIOCe2cc(ccc12)S(=O)(=O)NICCCC1
COCCNS(=O)(=O)c1ccc2B(O)OCc2c1
COc1ccc(Sc2ccc3COB(O)c3c2)cc1
Cl.NC[C@H]IOB(O)c2c1ccc2OCCCCO
Cl.NCCIOB(O)c2c1ccc2OCCCCO
OBIOCe2cc(Oc3ccc(C#N)c(c3)C#N)ccc12
COc1cc(Oc2ccc3B(O)OCc3c2)ccc1C#N
COc1nc(Oc2ccc3B(O)OCc3c2)ccc1C#N
OBIOCe2ccc(NS(=O)(=O)c3ccccc3)cc12
OBIOCe2ccc(cc12)S(=O)c1ccc(Cl)cc1
Cl.Cl.CN(CCN)Cc1ccc2COB(O)c2c1
Cl.NC[C@H]IOB(O)c2c1c(Cl)ccc2OCCO
OBIOCe2cc(Oc3ccc4C(=N)NC(=O)c4c3)ccc12
OBIOCe2cc(Oc3ccc4C(=O)NC(=O)c4c3)ccc12
OBIOCe2c1ccc2Nc1nc(Cl)nc1Cl
CCOC(=O)c1enc(Oc2ccc3COB(O)c3c2)nc1
Cc1cc(Oc2nnc(N)s2)cc2B(O)O[C@@H](CC(O)=O)c12
Cl.NCc1ccc(Oc2ccc3COB(O)c3c2)c(Cl)c1
COCCOc1nc(Oc2ccc3B(O)OCc3c2)ccc1C#N
CCCCOC(=O)c1ccc(Oc2ccc3B(O)OCc3c2)nc1
OBIOCe2cc(Oc3ccc(C#N)c(OC4CCCC4)n3)ccc12
OC[C@H]1CN(C(=O)O1)c1ccc(c(F)c1)-c1ccc2COB(O)c2c1
COc1cc(cc(OC)c1OC)C(=O)C=Cc1ccc2COB(O)c2c1
CC1(C)OB(O)c2cc(NC(=O)c3ccc(F)cc3C(F)(F)F)ccc12
OBIOCe2cc(F)c(COCOCc3cc4B(O)OCc4cc3F)cc12
CNC(=O)c1c(Oc2cc(Nc3cc4COB(O)c4c(Cl)c3)S(C)(=O)=O)c(cc12)C1CC1)-c1ccc(F)cc1
CCIOB(O)c2cc(CO)c(F)cc12
CC(C)NC(=O)c1ccc2COB(O)c2c1
OBIOCe2ccc(cc12)C(=O)NICCCC1
CS(C)(=O)=NC(=O)c1ccc2COB(O)c2c1
CC(NC(=O)c1ccc2B(O)OCc2c1)C(F)F
NC(=O)C1CN(C1)C(=O)c1ccc2B(O)OCc2c1
CC1(F)CCN(C1)C(=O)c1ccc2COB(O)c2c1
COC(C)[C@H](C)NC(=O)c1ccc2COB(O)c2c1
OBIOCe2ccc(cc12)C(=O)NC1CC(F)(F)C1
OBIOCe2ccc(cc12)C(=O)NC1CCCC1C#N
CC1CCC(C)N(C1)C(=O)c1ccc2COB(O)c2c1
CC1CCC(C)N(C1)C(=O)c1ccc2B(O)OCc2c1
CN(CC1CCCC1)C(=O)c1ccc2COB(O)c2c1
CC1CCCCN1NC(=O)c1ccc2COB(O)c2c1
CON(C)CCCNC(=O)c1ccc2COB(O)c2c1
CON(C)CCCNC(=O)c1ccc2B(O)OCc2c1

OBIOCe2cc(ccc12)C(=O)NICCOIC(F)(F)F
OBIOCe2ccc(cc12)C(=O)NICCOIC(F)(F)F
CC1NC(=O)C(C)N(C1C)C(=O)c1ccc2COB(O)c2c1
OBIOCe2ccc(cc12)C(=O)NICC(C1)NICCOCC1
CN(C)C1(C)CCN(CC1)C(=O)c1ccc2B(O)OCc2c1
CN(C)C1(C)CCN(CC1)C(=O)c1ccc2COB(O)c2c1
CCC(O)C1CCCCNIC(=O)c1ccc2B(O)OCc2c1
CCC(O)C1CCCCNIC(=O)c1ccc2COB(O)c2c1
CN(C)CC1(O)CCN(C1)C(=O)c1ccc2B(O)OCc2c1
OBIOCe2cc(ccc12)C(=O)NICCCC1c1ncccn1
CCC(Cc1cccc1)NC(=O)c1ccc2COB(O)c2c1
CCC(Cc1cccc1)NC(=O)c1ccc2B(O)OCc2c1
OBIOCe2cc(ccc12)C(=O)NCc1cc2CCCCn2n1
OBIOCe2ccc(cc12)C(=O)NCc1cc2CCCCn2n1
Cn1cc(CC2CN(C2)C(=O)c2ccc3B(O)OCc3c2)n1
OBIOCe2cc(ccc12)C(=O)NICCC(C1)c1cc(O)[nH]n1
OBIOCe2ccc(cc12)C(=O)NICCN(CC1)c1nc[nH]n1
Cn1ccnc1C1(O)CN(C1)C(=O)c1ccc2B(O)OCc2c1
OBIOCe2ccc(cc12)C(=O)NICCCC1C(=O)CCC=C
CN1CC2(C)CN(CC2(C)C1)C(=O)c1ccc2B(O)OCc2c1
CN(C)C1CC(NC(=O)c2ccc3COB(O)c3c2)C11CCC1
CCc1csc(n1)C(C)NC(=O)c1ccc2B(O)OCc2c1
CCN(C1CCOC(C)(C)C1)C(=O)c1ccc2COB(O)c2c1
CCN(C1CCOC(C)(C)C1)C(=O)c1ccc2B(O)OCc2c1
CC(NC(=O)c1ccc2COB(O)c2c1)C1CN(C)CCNIC
CN1CCC(CC1)N(CCO)C(=O)c1ccc2B(O)OCc2c1
NC(=O)C(F)C1CCN(CC1)C(=O)c1ccc2B(O)OCc2c1
OBIOCe2cc(ccc12)C(=O)NIC2CCC1c1cncnc1C2
Cc1cc(C)nc(n1)C1CN(C1)C(=O)c1ccc2COB(O)c2c1
OBIOCe2ccc(cc12)C(=O)NICCc2nc[nH]c2C11CCC1
OBIOCe2cc(ccc12)C(=O)NICCc2nc[nH]c2C11CCC1
Cc1n[nH]c(n1)NICCN(CC1)C(=O)c1ccc2COB(O)c2c1
COC1(CN(C1)C(=O)c1ccc2B(O)OCc2c1)c1cnnn1C
CC(CC(=O)c1cccs1)NC(=O)c1ccc2COB(O)c2c1
OBIOCe2ccc(cc12)C(=O)NCC12COCCN1CCOC2
OCCCCN1CCN(CC1)C(=O)c1ccc2COB(O)c2c1
OBIOCe2ccc(cc12)C(=O)NICC2(CCC2)C1c1cccn1
CCOC(=O)C(F)C1CCN(C1)C(=O)c1ccc2B(O)OCc2c1
Cc1nn(cc1NC(=O)c1ccc2B(O)OCc2c1)C1CCOCC1
Cc1nnc(N2CCN(CC2)C(=O)c2ccc3B(O)OCc3c2)n1C
OBIOCe2ccc(cc12)C(=O)NICCN(CC1)c1cc(F)nen1
CN1CCC2(CCC(CC2)NC(=O)c2ccc3B(O)OCc3c2)CC1
CN(C)c1nc2CCN(Cc2s1)C(=O)c1ccc2B(O)OCc2c1
OBIOCe2cc(ccc12)C(=O)NC1CCN(CC1)C1CCOCC1
OBIOCe2ccc(cc12)C(=O)NC1CCN(CC1)C1CCOCC1
COC(OC)C(=O)NICCN(CC1)C(=O)c1ccc2COB(O)c2c1
OBIOCe2cc(ccc12)C(=O)NIC[C@@H]2C[C@H]1CN2Cc1cccc1
CC(C)n1cnc2ccc(CNC(=O)c3ccc4B(O)OCc4c3)cc12
OBIOCe2cc(ccc12)C(=O)NICCCCC1C(O)c1cccc1
OBIOCe2ccc(cc12)C(=O)NICCCCC1C(O)c1cccc1
OBIOCe2ccc(cc12)C(=O)NICCC(O)(Cc2cccn2)CC1

CCN(C1CCN(CC(F)(F)F)C1)C(=O)c1ccc2COB(O)c2c1
CCN(C1CCN(CC(F)(F)F)C1)C(=O)c1ccc2B(O)OCc2c1
COCC1(CC2(CN(C2C(C)C)C(=O)e2ccc3COB(O)c3c2)C1)OC
OB1OCCe2ccc(cc12)C(=O)N1CCCC(O)C1CCc1ccccc1
CC(C)(C)OC(=O)N1CC(C1)N(C1CC1)C(=O)c1ccc2B(O)OCc2c1
CN1CCN(CC1)C(=O)N1CCN(CC1)C(=O)c1ccc2COB(O)c2c1
OB1OCCe2cc(ccc12)C(=O)N1CCN(CC2CCCS2(=O)=O)CC1
OB1OCCe2ccc(cc12)C(=O)N1CCN(CC2CCCS2(=O)=O)CC1
COCC(=O)N1CCc2ccc(NC(=O)c3ccc4B(O)OCc4c3)cc12
COCC(=O)N1CCc2ccc(NC(=O)c3ccc4COB(O)c4c3)cc12
COC(=O)[C@@H]1CN(C[C@H]1c1ccc(O)cc1)C(=O)c1ccc2COB(O)c2c1
CC12CN(Cc3ccccc3)CC1(C)CN(C2)C(=O)c1ccc2B(O)OCc2c1
CN(C)c1ccc(CN(CC(F)(F)F)C(=O)c2ccc3B(O)OCc3c2)cc1
CN(C)c1ccc(CN(CC(F)(F)F)C(=O)c2ccc3COB(O)c3c2)cc1
COCC1(CC2(CN(C2c2ccc2)C(=O)c2ccc3COB(O)c3c2)C1)OC

Table S2 Smiles of 6-membered borocycles subjected to covalent virtual screening

NC1CCCOBIO
OB1OCCe2ccccc12
Cl.NC1CCCOBIO
Nc1ccc2CCOB(O)c2c1
OB1OCCe2cc(F)ccc12
CC1COB(O)c2cc(N)ccc12
CC1(C)Ce2ccc(N)cc2B(O)O1
OB1OCCe2cccc(C(O)=O)c12
OB1OCCe2ccc(cc12)C(O)=O
OB1OCCe2ccc(cc12)[N+](=[O-])=O
COC(=O)c1ccc2C=COB(O)c12
COC(=O)c1ccc2CCOB(O)c12
COC(=O)c1ccc2CCOB(O)c2c1
OB1O[C@H](CC(O)=O)CC[C@@H]1NC(=O)Cc1cccs1
OB1OC(CC(O)=O)CCC1NC(=O)Cc1cccs1
OB1Oe2ccccc2-c2ccccc12
CCC(=C)C(=O)Nc1ccc2CCOB(O)c2c1
CC=CC(O)C(=O)Nc1ccc2CCOB(O)c2c1
CCC(=C)C(=O)Nc1ccc2CC(C)(C)OB(O)c2c1
CC(C)CC(=C)C(=O)Nc1ccc2CCOB(O)c2c1
CN1CCC[C@@H]1C(=O)Nc1ccc2CCOB(O)c2c1
OB1OCCe2ccc(NC(=O)C3CCCCO3)cc12
CC[C@H](N(C)C)C(=O)Nc1ccc2CCOB(O)c2c1
CCn1ccc(nn1)C(=O)Nc1ccc2CCOB(O)c2c1
CCCC=CC(O)C(=O)Nc1ccc2CCOB(O)c2c1
CC=CC(O)C(=O)Nc1ccc2CC(C)(C)OB(O)c2c1
CC(C)(C)NCCC(=O)Nc1ccc2CCOB(O)c2c1
COC(=O)CC(=O)Nc1ccc2CC(C)(C)OB(O)c2c1
Cc1c[nH]nc1C(=O)Nc1ccc2CC(C)(C)OB(O)c2c1
Cn1cccnc1CCC(=O)Nc1ccc2CCOB(O)c2c1
OB1OCCe2ccc(NC(=O)C34CCN(C3)CCC4)cc12
OCCn1ccc(en1)C(=O)Nc1ccc2CCOB(O)c2c1
CN1CCC[C@@H]1C(=O)Nc1ccc2CC(C)(C)OB(O)c2c1
CC1(C)Ce2ccc(NC(=O)C3CCCCO3)cc2B(O)O1

CN1CC(O)CC1(C)C(=O)Nc1ccc2CCOB(O)c2c1
CC[C@H](N(C)C)C(=O)Nc1ccc2CC(C)(C)OB(O)c2c1
CCC(O)C(C)C(=O)Nc1ccc2CC(C)(C)OB(O)c2c1
OB1OCCe2ccc(NC(=O)CN3CSCC3=O)cc12
OB1OCCe2ccc(NC(=O)C3CCC(Cl)CC3)cc12
OB1OCCe2ccc(NC(=O)c3cc4CCCCe4o3)cc12
CN(C)c1ncccc1C(=O)Nc1ccc2CCOB(O)c2c1
CCNc1cccnc1C(=O)Nc1ccc2CCOB(O)c2c1
Cc1ncc(C(=O)Nc2ccc3CC(C)(C)OB(O)c3c2)n1C
Cc1nc(C(=O)Nc2ccc3CC(C)(C)OB(O)c3c2)c(C)[nH]1
Cc1ncc(CC(=O)Nc2ccc3CC(C)(C)OB(O)c3c2)o1
OB1OCCe2ccc(NC(=O)C3CCC4CCCCN34)cc12
CC1CN2CCN1CC2C(=O)Nc1ccc2CCOB(O)c2c1
CC(C)(N1CCCC1)C(=O)Nc1ccc2CCOB(O)c2c1
CCCC=CC(O)C(=O)Nc1ccc2CC(C)(C)OB(O)c2c1
CN1CCN(C)CC(Cl)C(=O)Nc1ccc2CCOB(O)c2c1
CC1(CC1Br)C(=O)Nc1ccc2CCOB(O)c2c1
CS(=O)(=O)N1CC(Cl)C(=O)Nc1ccc2CCOB(O)c2c1
COc1ccc(C)cc1CC(=O)Nc1ccc2CCOB(O)c2c1
CC1CCe2nc(en2C1)C(=O)Nc1ccc2CCOB(O)c2c1
CC(C)Nc1ncccc1C(=O)Nc1ccc2CCOB(O)c2c1
CC1CNc2c(en2C1)C(=O)Nc1ccc2CCOB(O)c2c1
CCOc1ccc(CNc2ccc3CCOB(O)c3c2)ccc1OC
CC1(C)[C@@H]2CC[C@@]1(C(=O)Nc1ccc3CCOB(O)c3c1)C(=O)C2
Cn1ccnc1CCC(=O)Nc1ccc2CC(C)(C)OB(O)c2c1
CC1(C)Cc2ccc(NC(=O)C34CCN(C3)CCC4)cc2B(O)O1
CC1CC2CCC(CN2C1)C(=O)Nc1ccc2CCOB(O)c2c1
Cn1cc(C(=O)Nc2ccc3CC(C)(C)OB(O)c3c2)n(C)c1=O
CC1(C)Cc2ccc(NC(=O)c3enn(CCO)c3)cc2B(O)O1
OB1OCCe2ccc(NC(=O)c3nnc(NC4CC4)s3)cc12
CC(C)(C)N1CC(CC1=O)C(=O)Nc1ccc2CCOB(O)c2c1
OB1OCCe2ccc(NC(=O)C3CN(C3)C3CCOCC3)cc12
CNc1nc(es1)C(=O)Nc1ccc2CC(C)(C)OB(O)c2c1
CC1(C)Cc2ccc(NC(=O)CN3CSCC3=O)cc2B(O)O1
CC1(C)Cc2ccc(NC(=O)C3CCC(Cl)CC3)cc2B(O)O1
OB1OCCe2ccc(NC(=O)c3ccnc(NC4CCC4)c3)cc12
CC(O)(CCc1cccc1)C(=O)Nc1ccc2CCOB(O)c2c1
CN(C)c1ncccc1C(=O)Nc1ccc2CC(C)(C)OB(O)c2c1
CN(C)c1cccnc1C(=O)Nc1ccc2CC(C)(C)OB(O)c2c1
CC1(C)Cc2ccc(NC(=O)CCc3cccc(O)c3)cc2B(O)O1
Cc1ccc(O)ccc1CC(=O)Nc1ccc2CC(C)(C)OB(O)c2c1
CN1CCCC1c1cc([nH]n1)C(=O)Nc1ccc2CCOB(O)c2c1
Cc1cn(en1)C(C)(C)C(=O)Nc1ccc2CC(C)(C)OB(O)c2c1
CC1(C)Cc2ccc(NC(=O)C3CCC4CCCCN34)cc2B(O)O1
COC12CCC(CC1)C(=O)Nc1ccc3CCOB(O)c3c1)C(=O)C2
CC1CN2CCN1CC2C(=O)Nc1ccc2CC(C)(C)OB(O)c2c1
CC(C)(N1CCCC1)C(=O)Nc1ccc2CC(C)(C)OB(O)c2c1
CC1(C)Cc2ccc(NC(=O)CNC(=O)N3CCCC3)cc2B(O)O1
CC(N1CCN(C)CC1)C(=O)Nc1ccc2CC(C)(C)OB(O)c2c1
CC(C)N1CCN(CCC(=O)Nc2ccc3CCOB(O)c3c2)CC1
CCNc1ncc(cc1Cl)C(=O)Nc1ccc2CCOB(O)c2c1

CC1(C)Cc2ccc(NC3c[nH]nc3-c3ccnc3)cc2B(O)O1
CC1(C)Cc2ccc(NC(=O)Cn3enc4ccccc34)cc2B(O)O1
CC1(C)Cc2ccc(NC(=O)C3CN(C3)S(C)(=O)=O)cc2B(O)O1
COc1cc(CO)ccc1C(=O)Nc1ccc2CC(C)(C)OB(O)c2c1
CN(C)CCn1nccc1C(=O)Nc1ccc2CC(C)(C)OB(O)c2c1
CC(C)NICCN(CCCC(=O)Nc2ccc3CCOB(O)c3c2)CC1
CCOC(=O)C1CCCN(CC(=O)Nc2ccc3CCOB(O)c3c2)C1
Cc1[nH]nc(C(=O)Nc2ccc3CC(C)(C)OB(O)c3c2)c1C(F)(F)F
CN1CCCC1c1cc([nH]n1)C(=O)Nc1ccc2CC(C)(C)OB(O)c2c1
OB1OCCc2ccc(NC(=O)c3ccn3CCN3CCOCC3)cc12
CC1=C(C)C(=O)N(CCC(=O)Nc2ccc3CC(C)(C)OB(O)c3c2)C1=O
CC1(C)Cc2ccc(NC(=O)C3CC4CSCC(C3)C4=O)cc2B(O)O1
CC(C)NICCN(CCC(=O)Nc2ccc3CC(C)(C)OB(O)c3c2)CC1
CC1(C)Cc2ccc(NC(=O)C3CCC(CC3)N3CCOCC3)cc2B(O)O1
CC(C)NICCN(CCCC(=O)Nc2ccc3CC(C)(C)OB(O)c3c2)CC1
