Table S1. Set of FXR ligands curated from the published literature.

Class	[Ref.]	Class-[Ref.]-Ref.ID	D3R ID	PDB ID	IC50 (uM)	pIC50 (M)	SMILES
Benzimidazole	1	B-1-1			0.013	-7.89	Clc1c(F)cc2nc(n([C@H](C(=O)NC3CCCCC3)C3CCCCC3)c2c1)-c1ccc(Cl)cc1
Benzimidazole	1	B-1-7a			0.010	-8.00	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)NC3CCCCC3)C3CCCCC3)c3c(n2)cc(F)c(F)c3)cc1
Benzimidazole	1	B-1-7aa			1.700	-5.77	Clc1ncc(-c2n([C@H](C(=O)NC3CCC(C(=O)O)CC3)C3CCCCC3)c3c(n2)cc(F)c(F)c3)cc1
Benzimidazole	1	B-1-7ab	FXR_64,68		0.210	-6.68	Fc1c(F)cc2nc(n([C@H](C(=O)NC3CCC(C(=O)O)CC3)C3CCCCC3)c2c1)-c1c(OC)nc(OC)cc1
Benzimidazole	1	B-1-7ac			0.290	-6.54	Clc1nc(OC)c(-c2n([C@H](C(=O)NC3CCC(C(=O)O)CC3)C3CCCCC3)c3c(n2)cc(F)c(F)c3)cc1
Benzimidazole	1	B-1-7b			0.041	-7.39	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)NC3CCC(O)CC3)C3CCCCC3)c3c(n2)cc(F)c(F)c3)cc1
Benzimidazole	1	B-1-7c			0.610	-6.21	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)NC3CCC(C(=O)O)CC3)C3CCCCC3)c3c(n2)cc(F)c(F)c3)cc1
Benzimidazole	1	B-1-7d	FXR_53	3OOF	0.050	-7.30	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)Nc3ccc(C(=O)O)cc3)C3CCCCC3)c3c(n2)cc(F)c(F)c3)cc1
Benzimidazole	1	B-1-7e			0.320	-6.49	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)Nc3c(C(=O)O)cccc3)C3CCCCC3)c3c(n2)cc(F)c(F)c3)cc1
Benzimidazole	1	B-1-7f			1.300	-5.89	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)Nc3cc(C(=O)O)ccc3)C3CCCCC3)c3c(n2)cc(F)c(F)c3)cc1
Benzimidazole	1	B-1-7g	FXR_58	3OMM	0.037	-7.43	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)Nc3c(F)cc(C(=O)O)cc3)C3CCCCC3)c3c(n2)cc(F)c(F)c3)cc1
Benzimidazole	1	B-1-7h	FXR_27		0.009	-8.05	Clc1c(NC(=O)[C@@H](n2c(-c3ccc(Cl)cc3)nc3c2cc(F)c(F)c3)C2CCCCC2)ccc(C(=O)O)c1
Benzimidazole	1	B-1-7i		3OLF	0.020	-7.70	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)Nc3c(C)cc(C(=O)O)cc3)C3CCCCC3)c3c(n2)cc(F)c(F)c3)cc1
Benzimidazole	1	B-1-7j			0.008	-8.10	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)Nc3c(C(F)(F)F)cc(C(=O)O)cc3)C3CCCCC3)c3c(n2)cc(F)c(F)c3)cc1
Benzimidazole	1	B-1-7k			0.740	-6.13	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)Nc3c(OC)cc(C(=O)O)cc3)C3CCCCC3)c3c(n2)cc(F)c(F)c3)cc1
Benzimidazole	1	B-1-7l		3OOK	0.004	-8.40	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)Nc3c(F)cc(C(=O)O)cc3F)C3CCCCC3)c3c(n2)cc(F)c(F)c3)cc1
Benzimidazole	1	B-1-7m			1.400	-5.85	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)Nc3ccc(CC(=O)O)cc3)C3CCCCC3)c3c(n2)cc(F)c(F)c3)cc1
Benzimidazole	1	B-1-7n			0.060	-7.22	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)Nc3ccc(CCC(=O)O)cc3)C3CCCCC3)c3c(n2)cc(F)c(F)c3)cc1
Benzimidazole	1	B-1-7o			0.013	-7.89	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)Nc3c(F)cc(CCC(=O)O)cc3)C3CCCCC3)c3c(n2)cc(F)c(F)c3)cc1
Benzimidazole	1	B-1-7p			0.001	-9.00	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)Nc3ccc(OC4C(C(=O)O)C4)cc3)C3CCCCC3)c3c(n2)cc(F)c(F)c3)cc1
Benzimidazole	1	B-1-7q			3.900	-5.41	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)NCC3CCC(C(=O)O)CC3)C3CCCCC3)c3c(n2)cc(F)c(F)c3)cc1
Benzimidazole	1	B-1-7r			0.610	-6.21	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)NC3CCC(CC(=O)O)CC3)C3CCCCC3)c3c(n2)cc(F)c(F)c3)cc1
Benzimidazole	1	B-1-7s			0.830	-6.08	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)NC3CCC(OCC(=O)O)CC3)C3CCCCC3)c3c(n2)cc(F)c(F)c3)cc1
Benzimidazole	1	B-1-7t			0.090	-7.05	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)Nc3sc(C(=O)O)c(C)n3)C3CCCCC3)c3c(n2)cc(F)c(F)c3)cc1
Benzimidazole	1	B-1-7u			0.200	-6.70	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)Nc3sc(C(=O)O)c(C(F)(F)F)n3)C3CCCCC3)c3c(n2)cc(F)c(F)c3)cc1
Benzimidazole	1	B-1-7v			0.200	-6.70	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)Nc3ncc(C(=O)O)cc3)C3CCCCC3)c3c(n2)cc(F)c(F)c3)cc1
Benzimidazole	1	B-1-7w			3.100	-5.51	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)Nc3cnc(C(=O)O)cc3)C3CCCCC3)c3c(n2)cc(F)c(F)c3)cc1
Benzimidazole	1	B-1-7x			0.008	-8.10	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)Nc3c(F)cc(-c4[nH]nnn4)cc3)C3CCCCC3)c3c(n2)cc(F)c(F)c3)cc1
Benzimidazole	1	B-1-7y			0.040	-7.40	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)Nc3c(F)cc(C(=O)O)cc3)C3CCCCC3)c3c(n2)cc(F)cc3)cc1
Benzimidazole	1	B-1-7z			0.010	-8.00	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)Nc3c(C(F)(F)F)cc(C(=O)O)cc3)C3CCCCC3)c3c(n2)cccc3)cc1
Benzimidazole	2	B-2-1a		3OKI	0.070	-7.15	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)NC3CCCCC3)C3CCCCC3)c3c(n2)cccc3)cc1
Benzimidazole	2	B-2-1b			1.250	-5.90	O=C(NC1CCCCC1)[C@@H](n1c(-c2ccc(C#N)cc2)nc2c1cccc2)C1CCCCC1
Benzimidazole	2	B-2-1c			12.440	-4.91	S(=O)(=O)(C)c1ccc(-c2ccc(-c3n([C@H](C(=O)NC4CCCCC4)C4CCCCC4)c4c(n3)cccc4)cc2)cc1
Benzimidazole	2	B-2-1d			30.440	-4.52	O=C(NC1CCCCC1)[C@@H](n1c(-c2ccncc2)nc2c1cccc2)C1CCCCC1
Benzimidazole	2	B-2-1f			0.910	-6.04	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)NC3CCCCC3)CC(CC)C)c3c(n2)cccc3)cc1
Benzimidazole	2	B-2-1g			3.800	-5.42	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)NC3CCCCC3)C3CCOCC3)c3c(n2)cccc3)cc1
Benzimidazole	2	B-2-1h			14.780	-4.83	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)NC3CCCCC3)C3CCN(C(=O)C)CC3)c3c(n2)cccc3)cc1
Benzimidazole	2	B-2-1i			25.120	-4.60	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)NC3CCCCC3)c3ccncc3)c3c(n2)cccc3)cc1
Benzimidazole	2	B-2-1k			0.150	-6.82	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)Nc3ccccc3)C3CCCCC3)c3c(n2)cccc3)cc1
Benzimidazole	2	B-2-1l			2.720	-5.57	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)NC3CCC(F)(F)CC3)C3CCCCC3)c3c(n2)cccc3)cc1
Benzimidazole	2	B-2-1m			3.610	-5.44	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)NC3CC3)C3CCCCC3)c3c(n2)cccc3)cc1
Benzimidazole	2	B-2-1n			3.710	-5.43	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)NC3CCOCC3)C3CCCCC3)c3c(n2)cccc3)cc1
Benzimidazole	2	B-2-1p			0.450	-6.35	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)NC3CCCCC3)C3CCCCC3)c3c(n2)ccc(OC)c3)cc1
Benzimidazole	2	B-2-1q			5.170	-5.29	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)NC3CCCCC3)C3CCCCC3)c3c(n2)ccc(N(C)C)c3)cc1
Benzimidazole	2	B-2-1r		3OKH	5.720	-5.24	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)NC3CCCCC3)C3CCCCC3)c3c(n2)ccc(C(=O)O)c3)cc1
Benzimidazole	2	B-2-1s			6.190	-5.21	Clc1ccc(-c2n([C@H](C(=O)NC3CCCCC3)C3CCCCC3)c3c(n2)ccc(CO)c3)cc1
Indole	4	Ind-4-FXR450		3FLI	0.003	-8.52	Fc1c(F)ccc(C(=O)N2C=C(C(=O)OC(C)C)c3[nH]c4c(c3C(C)(C)C2)cccc4)c1
Indole	1	Ind-1-RefCmpd	FXR_5		0.021	-7.68	Fc1c(F)ccc(C(=O)N2C=C(C(=O)OCC)c3[nH]c4c(c3C(C)(C)C2)cccc4)c1
Isoxazole	3	Isx-3-7b	FXR_33		0.045	-7.35	Clc1c(-c2c(COc3cc(C)c(-c4cc5n(C)cc(C(=O)O)c5cc4)cc3)c(C(C)C)on2)c(Cl)c[n+]([O-])c1
Isoxazole	3	Isx-3-7a	FXR_65	3FXV	0.094	-7.03	Clc1c(-c2c(COc3cc(C)c(-c4cc5n(C)cc(C(=O)O)c5cc4)cc3)c(C(C)C)on2)c(Cl)cnc1
Isoxazole	5	Isx-5-1		3DCT	0.059	-7.23	Clc1c(C=Cc2cc(C(=O)[O-])ccc2)ccc(OCc2c(C(C)C)onc2-c2c(Cl)cccc2Cl)c1
Isoxazole	7	Isx-7-1b		3DCU	0.087	-7.06	Clc1c(-c2c(COc3ccc(-c4cc5c(c(C(=O)[O-])ccc5)cc4)cc3)c(C(C)C)on2)c(Cl)ccc1
Isoxazole	6	Isx-6-1n		3GD2	0.028	-7.55	Clc1c(C=Cc2cc(C(=O)[O-])ccc2)ccc(OCC2=C(C[SH0](=O)c3c(Cl)cccc3Cl)NOC2C(C)C)c1
Isoxazole	5	Isx-5-3a		3HC6	0.320	-6.49	Clc1c(-c2c(COc3cc4c(n(Cc5cc(C(=O)[O-])ccc5)cc4)cc3)c(C(C)C)on2)c(Cl)ccc1
Isoxazole	5	Isx-5-2c		3HC5	0.140	-6.85	Clc1c(-c2c(COc3cc4sc(-c5cc(C(=O)[O-])ccc5)cc4cc3)c(C(C)C)on2)c(Cl)ccc1
Isoxazole	8	Isx-8-1c		3P89	0.120	-6.92	Clc1c(c(Cl)ccc1)C=1C(COc2ccc(-c3cc4c(nc(C(=O)[O-])cc4)cc3)cc2)C(C(C)C)ON=1
Isoxazole	8	Isx-8-1f		3RUT	0.021	-7.68	Clc1c(-c2c(COc3ccc(-c4cc5scc(C(=O)[O-])c5cc4)cc3)c(C(C)C)on2)c(Cl)ccc1
Isoxazole	8	Isx-8-1g		3RUU	0.020	-7.70	Clc1c(-c2c(COc3ccc(-c4cc5[nH]cc(C(=O)[O-])c5cc4)cc3)c(C(C)C)on2)c(Cl)ccc1
Isoxazole	8	Isx-8-1l		3RVF	0.088	-7.06	Clc1c(-c2c(COc3ccc(-c4cc5c([nH]c(C(=O)[O-])c5)cc4)cc3)c(C(C)C)on2)c(Cl)ccc1
Steroid	4	St-4-6ECDCA		1OT7, 1OSV	3.747	-5.43	O=C([O-])CCC(C)C1C2(C)C(C3C(O)C(CC)C4C(C)(C3CC2)CCC(O)C4)CC1

[1] Richter et al. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2011**, *21*, 1134.
[2] Richter et al. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2011**, *21*, 191.
[3] Feng et al. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2009**, *19*, 2595.
[4] Gardes et al. *J. Lipid Res.* **2011**, *52*, 1188.
[5] Akwabi-Ameyaw et al. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2009**, *19*, 4733.
[6] Bass et al. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2009**, *21*, 2969.
[7] Akwabi-Ameyaw et al. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2008**, *18*, 4339.
[8] Akwabi-Ameyaw et al. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2011**, *21*, 6154.