## table1_HTS_Azole_Library
| Unnamed: 0 | Unnamed: 1 | maximum allowed compound concentration due to ligand absorbance (µM), if less than 600 µM in assay plate | Unnamed: 3 | Unnamed: 4 | Unnamed: 5 | Unnamed: 6 | Unnamed: 7 | Unnamed: 8 | Unnamed: 9 | Unnamed: 10 | Unnamed: 11 | Unnamed: 12 | CYP2A6 | Unnamed: 14 | Unnamed: 15 | Unnamed: 16 | Unnamed: 17 | Unnamed: 18 | CYP2D6 | Unnamed: 20 | Unnamed: 21 | Unnamed: 22 | Unnamed: 23 | Unnamed: 24 | CYP8B1 | Unnamed: 26 | Unnamed: 27 | Unnamed: 28 | Unnamed: 29 | Unnamed: 30 | Unnamed: 31 | Stability Score Key | Unnamed: 33 |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Chemical Name | Stability Score | NaN | Vendor | Catalog Number | Molecular Weight | CAS | Pubchem ID | cLogP | Rotatable Bonds | TPSA (Å²) | IUPAC name | SMILES | Kd | Kd 95% CI | ∆Amax | ∆Amax 95% CI | ∆Amax/Kd | BIC | Kd | Kd 95% CI | ∆Amax | ∆Amax 95% CI | ∆Amax/Kd | BIC | Kd | Kd 95% CI | ∆Amax | ∆Amax 95% CI | ∆Amax/Kd | BIC | NaN | score | feature |
| efinaconazole | 0 | NaN | sigma | SML1244-10MG | 348.4 | 164650-44-6 | 489181 | 2 | 5 | 54.2 | (2R,3R)-2-(2,4-difluorophenyl)-3-(4-methylidenepiperidin-1-yl)-1-(1,2,4-triazol-1-yl)butan-2-ol | C[C@@H](N1CCC(CC1)=C)[C@@](CN2N=CN=C2)(O)C3=CC=C(F)C=C3F | 113.3 | (101.3 to 126.7) | 0.04374 | (0.04199 to 0.04561) | 0.000386 | -103.843336 | 28.21 | 18.16 to 42.48 | 0.01278 | 0.01147 to 0.01423 | 0.000453 | -127.195569 | 38.71 | 33.05 to 45.37 | 0.02949 | 0.02800 to 0.03109 | 0.000762 | -139.51121 | NaN | 0 | reproducible over 4 months |
| miconazole impurity B | 0 | NaN | Toronto Research Chemicals | TRC-M342485-10MG | 381.68 | 913837-72-6 | 76330677 | 4.7 | 6 | 27 | 1-[2-[(3-chlorophenyl)methoxy]-2-(2,4-dichlorophenyl)ethyl]imidazole | C1=CC(=CC(=C1)Cl)COC(CN2C=CN=C2)C3=C(C=C(C=C3)Cl)Cl | 1.404 | (1.080 to 1.821) | 0.06472 | (0.05997 to 0.06987) | 0.046097 | -112.407906 | 2.52 | 1.932 to 3.339 | 0.03738 | 0.03312 to 0.04283 | 0.014833 | -138.972685 | 1.525 | 1.170 to 1.987 | 0.05656 | 0.05207 to 0.06153 | 0.037089 | -113.649645 | NaN | 1 | minor reduction in reproducibility over 4 months of library compound storage |
| Neticonazole Hydrochloride | 0 | NaN | sigma | TA9H93CFBF8B-25MG | 338.9 | 130773-02-3 | 5282432 | 4.1 | 8 | 52.4 | 1-[(E)-2-methylsulfanyl-1-(2-pentoxyphenyl)ethenyl]imidazole;hydrochloride | CCCCCOC1=CC=CC=C1C(=CSC)N2C=CN=C2 | 6.106 | (5.819 to 6.406) | 0.05891 | (0.05815 to 0.05968) | 0.009648 | -107.404546 | 2.927 | 2.408 to 3.541 | 0.02744 | 0.02612 to 0.02884 | 0.009375 | -122.222771 | 0.723 | 0.5802 to 0.9012 | 0.05326 | 0.04954 to 0.05740 | 0.073665 | -112.827473 | NaN | 2 | not reproducible over 4 months of library compound storage |
| neurodazine | -- | 9.0 | sigma | N6664-5MG | 456.92 | 937807-66-4 | NaN | 6.4 | 6 | 60.3 | 2-[5-(3-chlorophenyl)furan-2-yl]-4,5-bis(4-methoxyphenyl)-1H-imidazole | COC1=CC=C(C=C1)C2=C(N=C(N2)C3=CC=C(O3)C4=CC(=CC=C4)Cl)C5=CC=C(C=C5)OC | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | 3 | precipitated in frozen plate |
| Posaconazole | -- | 50.0 | sigma | SML2287-5MG | 700.8 | 171228-49-2 | 468595 | 4.6 | 12 | 112 | 4-[4-[4-[4-[[(3R,5R)-5-(2,4-difluorophenyl)-5-(1,2,4-triazol-1-ylmethyl)oxolan-3-yl]methoxy]phenyl]piperazin-1-yl]phenyl]-2-[(2S,3S)-2-hydroxypentan-3-yl]-1,2,4-triazol-3-one | O=C1N([C@@H](CC)[C@@H](O)C)N=CN1C2=CC=C(N3CCN(C4=CC=C(OC[C@@H]5CO[C@@](CN6N=CN=C6)(C7=CC=C(F)C=C7F)C5)C=C4)CC3)C=C2 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | 4.347 | 3.181 to 5.909 | 0.01578 | 0.01435 to 0.01741 | 0.00363 | -109.115998 | NaN | 4 | precipitated in both plates |
| RAF265 (CHIR-265) | -- | NaN | sigma | AMBH303C58DF-10MG | 518.4 | 927880-90-8 | 11656518 | 5.4 | 5 | 80.6 | 1-methyl-5-[2-[5-(trifluoromethyl)-1H-imidazol-2-yl]pyridin-4-yl]oxy-N-[4-(trifluoromethyl)phenyl]benzimidazol-2-amine | Cn1c(Nc2ccc(cc2)C(F)(F)F)nc2cc(Oc3ccnc(c3)-c3ncc([nH]3)C(F)(F)F)ccc12 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | -- | not measured |
| Tipifarnib (Zarnestra) | -- | 50.0 | sigma | SML1668-5MG | 489.4 | 192185-72-1 | 159324 | 4.1 | 4 | 64.2 | 6-[(R)-amino-(4-chlorophenyl)-(3-methylimidazol-4-yl)methyl]-4-(3-chlorophenyl)-1-methylquinolin-2-one | Cn1cncc1[C@@](N)(c1ccc(Cl)cc1)c1ccc2n(C)c(=O)cc(-c3cccc(Cl)c3)c2c1 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | 9.75 | 7.943 to 11.99 | 0.05883 | 0.05473 to 0.06341 | 0.006034 | -124.204426 | NaN | NaN | NaN |
| [2-(2,4-DICHLOROPHENYL)-2-(IMIDAZOL-1-YLMETHYL)-1,3-DIOXOLAN-4-YL]METHYL BENZOATE | 0 | NaN | AstaTech | F94419 | 433.3 | 138866-89-4 | 4288698 | 4.8 | 7 | 62.6 | [2-(2,4-dichlorophenyl)-2-(imidazol-1-ylmethyl)-1,3-dioxolan-4-yl]methyl benzoate | C1C(OC(O1)(CN2C=CN=C2)C3=C(C=C(C=C3)Cl)Cl)COC(=O)C4=CC=CC=C4 | 4.747 | (4.241 to 5.306) | 0.06239 | (0.06092 to 0.06389) | 0.013143 | -122.714885 | 2.016 | 1.786 to 2.269 | 0.03225 | 0.03144 to 0.03308 | 0.015997 | -130.077193 | 3.761 | 2.997 to 4.691 | 0.04854 | 0.04598 to 0.05124 | 0.012906 | -119.323179 | NaN | NaN | NaN |
| 1-Acetylimidazole | 2 | NaN | sigma | 157864-25G | 110.11 | 2466-76-4 | 17174 | -0.3 | 0 | 34.9 | 1-imidazol-1-ylethanone | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| 2-Chloro-1-(4-fluorobenzyl)benzoimidazole | 0 | NaN | Toronto Research Chemicals | TRC-C366290-1G | 260.69 | 84946-20-3 | NaN | 4.1 | 2 | 17.8 | NaN | C1=CC=C2C(=C1)N=C(N2CC3=CC=C(C=C3)F)Cl | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| Akti-1/2 | -- | 9.0 | Sigma | 124018-5MG | 551.6 | 612847-09-3 | 135398501 | 4.3 | 5 | 84.7 | 3-[1-[[4-(6-phenyl-8H-imidazo[4,5-g]quinoxalin-7-yl)phenyl]methyl]piperidin-4-yl]-1H-benzimidazol-2-one | C1CN(CCC1N2C3=CC=CC=C3NC2=O)CC4=CC=C(C=C4)C5=C(N=C6C=C7C(=NC=N7)C=C6N5)C8=CC=CC=C8 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| PC945 | -- | 50.0 | targetmol | T12376 | 682.7 | 1931946-73-4 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | FC1=C(C=CC(F)=C1)[C@]2(C[C@H](COC(C=CC(N3CCN(C4=CC=C(C(NC5=CC=C(F)C=C5)=O)C=C4)CC3)=C6)=C6C)CO2)CN7C=NC=N7 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| astemizole | 0 | NaN | sigma | A2861-10MG | 458.6 | 68844-77-9 | 2247 | 6 | 8 | 42.3 | 1-[(4-fluorophenyl)methyl]-N-[1-[2-(4-methoxyphenyl)ethyl]piperidin-4-yl]benzimidazol-2-amine | COC1=CC=C(C=C1)CCN2CCC(CC2)NC3=NC4=CC=CC=C4N3CC5=CC=C(C=C5)F | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| Atipamezole | 0 | NaN | sigma | A9611-5MG | 212.29 | 104054-27-5 | 71310 | 3 | 2 | 28.7 | 5-(2-ethyl-1,3-dihydroinden-2-yl)-1H-imidazole | CCC1(CC2=CC=CC=C2C1)C3=CN=CN3 | 8.724 | (8.299 to 9.168) | 0.07078 | (0.07004 to 0.07153) | 0.008113 | -114.282264 | 4.147 | 3.780 to 4.540 | 0.04947 | 0.04858 to 0.05038 | 0.011929 | -105.318531 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| Bifonazole | 0 | NaN | sigma | PHR1296-1G | 310.39 | 60628-96-8 | 2378 | 4.8 | 4 | 17.8 | 1-[phenyl-(4-phenylphenyl)methyl]imidazole | C1=CC=C(C=C1)C2=CC=C(C=C2)C(C3=CC=CC=C3)N4C=CN=C4 | 1.58 | (1.158 to 2.164) | 0.07622 | (0.06843 to 0.08533) | 0.048241 | -106.436498 | 6.466 | 5.406 to 7.725 | 0.02575 | 0.02435 to 0.02726 | 0.003982 | -117.629865 | 10.1 | 8.663 to 11.76 | 0.04343 | 0.04144 to 0.04556 | 0.0043 | -119.796965 | NaN | NaN | NaN |
| Butoconazole Nitrate | 0 | NaN | sigma | SML1663-100MG | 474.8 | 64872-77-1 | 47471 | 6.4 | 7 | 109 | 1-[4-(4-chlorophenyl)-2-(2,6-dichlorophenyl)sulfanylbutyl]imidazole;nitric acid | C1=CC(=C(C(=C1)Cl)SC(CCC2=CC=C(C=C2)Cl)CN3C=CN=C3)Cl | 1.882 | (1.677 to 2.110) | 0.06944 | (0.06704 to 0.07195) | 0.036897 | -112.537985 | 1.365 | 1.100 to 1.675 | 0.03025 | 0.02901 to 0.03154 | 0.022161 | -124.572748 | 1.728 | 1.501 to 1.982 | 0.05007 | 0.04863 to 0.05156 | 0.028976 | -120.329313 | NaN | NaN | NaN |
| Candesartan cilexetil | -- | NaN | sigma | SML0245-10MG | 610.66 | 145040-37-5 | 2540 | 7 | 13 | 143 | 1-cyclohexyloxycarbonyloxyethyl 2-ethoxy-3-[[4-[2-(2H-tetrazol-5-yl)phenyl]phenyl]methyl]benzimidazole-4-carboxylate | CCOC1=NC2=CC=CC(=C2N1CC3=CC=C(C=C3)C4=CC=CC=C4C5=NNN=N5)C(=O)OC(C)OC(=O)OC6CCCCC6 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| CDS007822; 3-imidazol-1-yl-propionic acid | -- | NaN | sigma | CDS007822-250MG | 140.14 | 18999-45-6 | 2794718 | -0.6 | 3 | 55.1 | 3-imidazol-1-ylpropanoic acid | C1=CN(C=N1)CCC(=O)O | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| Chk2 Inhibitor II (BML-277) | -- | NaN | sigma | C3742-5MG | 363.8 | 516480-79-8 | 9969021 | 4.3 | 4 | 81 | 2-[4-(4-chlorophenoxy)phenyl]-3H-benzimidazole-5-carboxamide | C1=CC(=CC=C1C2=NC3=C(N2)C=C(C=C3)C(=O)N)OC4=CC=C(C=C4)Cl | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| Ciproxifan hydrochloride | 0 | NaN | sigma | C6492-5MG | 306.8 | 1049741-81-2 | 16078963 | 2.5 | 7 | 55 | cyclopropyl-[4-[3-(1H-imidazol-5-yl)propoxy]phenyl]methanone;hydrochloride | C1CC1C(=O)C2=CC=C(C=C2)OCCCC3=CN=CN3 | 71.86 | (69.11 to 74.71) | 0.07334 | (0.07242 to 0.07427) | 0.001021 | -115.127288 | 1.105 | 0.9783 to 1.248 | 0.05151 | 0.04941 to 0.05374 | 0.046615 | -134.852548 | 82.73 | 78.06 to 87.70 | 0.0548 | 0.05375 to 0.05588 | 0.000662 | -116.089986 | NaN | NaN | NaN |
| Detomidine HCl | 0 | NaN | sigma | Y0000001 | 222.714 | 90038-01-0 | 56031 | 2.7 | 2 | 28.7 | 5-[(2,3-dimethylphenyl)methyl]-1H-imidazole;hydrochloride | CC1=C(C(=CC=C1)CC2=CN=CN2)C | 0.4714 | (0.3754 to 0.5785) | 0.07325 | (0.07141 to 0.07511) | 0.155388 | -113.460673 | 8.376 | 7.779 to 9.015 | 0.04287 | 0.04195 to 0.04380 | 0.005118 | -105.942251 | 187.4 | 148.1 to 238.9 | 0.04564 | 0.04140 to 0.05076 | 0.000244 | -107.335534 | NaN | NaN | NaN |
| Dexmedetomidine HCl (Precedex) | 0 | NaN | sigma | SML0956-10MG | 236.74 | 145108-58-3 | 6918081 | 3.1 | 2 | 28.7 | 5-[(1S)-1-(2,3-dimethylphenyl)ethyl]-1H-imidazole;hydrochloride | C[C@H](C1=CN=CN1)C2=CC=CC(C)=C2C | 3.466 | (2.977 to 4.026) | 0.06931 | (0.06721 to 0.07146) | 0.019997 | -103.93835 | 4.801 | 4.329 to 5.317 | 0.04306 | 0.04196 to 0.04420 | 0.008969 | -108.125641 | 395.6 | 219.9 to 807.2 | 0.02241 | 0.01668 to 0.03434 | 0.000057 | -124.146734 | NaN | NaN | NaN |
| Elubiol | 1 | NaN | Sigma | AMBH2D6FFAF3-5G | 561.46 | 67914-69-6 | 158496 | 5.1 | 9 | 78.3 | ethyl 4-[4-[[(2R,4S)-2-(2,4-dichlorophenyl)-2-(imidazol-1-ylmethyl)-1,3-dioxolan-4-yl]methoxy]phenyl]piperazine-1-carboxylate | CCOC(=O)N1CCN(CC1)c1ccc(OC[C@H]2CO[C@@](Cn3ccnc3)(O2)c2ccc(Cl)cc2Cl)cc1 | 12.99 | (10.91 to 15.46) | 0.07566 | (0.07125 to 0.08049) | 0.005824 | -68.105886 | 1.371 | 1.115 to 1.692 | 0.04187 | 0.03868 to 0.04552 | 0.03054 | -136.32491 | 1.146 | 0.8237 to 1.585 | 0.02111 | 0.01932 to 0.02306 | 0.018421 | -122.513374 | NaN | NaN | NaN |
| Fenticonazole Nitrate | -- | 50.0 | sigma | SML2509-50MG | 518.41 | 73151-29-8 | 51754 | 6.7 | 8 | 118 | 1-[2-(2,4-dichlorophenyl)-2-[(4-phenylsulfanylphenyl)methoxy]ethyl]imidazole;nitric acid | C1=CC=C(C=C1)SC2=CC=C(C=C2)COC(CN3C=CN=C3)C4=C(C=C(C=C4)Cl)Cl | 8.155 | 6.020 to 11.07 | 0.07161 | 0.06451 to 0.07997 | 0.008781 | -110.100178 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | 1.087 | 0.6205 to 1.898 | 0.0617 | 0.05158 to 0.07425 | 0.056762 | -89.534365 | NaN | NaN | NaN |
| IR415; 1-[3-(1-Imidazolyl)propyl]-3-(2,4-difluorophenyl)thiourea | 0 | NaN | Sigma | SML2138-5MG | 296.34 | 452967-14-5 | 2824621 | 1.8 | 5 | 74 | 1-(2,4-difluorophenyl)-3-(3-imidazol-1-ylpropyl)thiourea | C1=CC(=C(C=C1F)F)NC(=S)NCCCN2C=CN=C2 | 13.71 | 12.73 to 14.74 | 0.06558 | 0.06464 to 0.06653 | 0.004783 | -102.550073 | 10.27 | 8.601 to 12.26 | 0.03707 | 0.03499 to 0.03936 | 0.00361 | -115.364254 | 216.3 | 144.4 to 333.3 | 0.01872 | 0.01570 to 0.02301 | 0.000087 | -127.616302 | NaN | NaN | NaN |
| isavuconazole | -- | NaN | sigma | SML2357-5MG | 437.5 | 241479-67-4 | 6918485 | 3.5 | 6 | 116 | 4-[2-[(2R,3R)-3-(2,5-difluorophenyl)-3-hydroxy-4-(1,2,4-triazol-1-yl)butan-2-yl]-1,3-thiazol-4-yl]benzonitrile | N#CC1=CC=C(C2=CSC([C@@H]([C@@](O)(C3=CC(F)=CC=C3F)CN4N=CN=C4)C)=N2)C=C1 | 194.7 | 150.5 to 255.9 | 0.04741 | 0.04191 to 0.05451 | 0.000244 | -119.029002 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| ISCK03; Tert-Butylphenyl imidazolylphenyl sulfonamide | 0 | NaN | Sigma | I6410-5MG | 355.5 | 945526-43-2 | 3792751 | 3.9 | 5 | 72.4 | 4-tert-butyl-N-(4-imidazol-1-ylphenyl)benzenesulfonamide | CC(C)(C)C1=CC=C(C=C1)S(=O)(=O)NC2=CC=C(C=C2)N3C=CN=C3 | 5.942 | 5.075 to 6.946 | 0.0544 | 0.05211 to 0.05678 | 0.009155 | -110.912475 | 0.549 | 0.3691 to 0.8010 | 0.03715 | 0.03342 to 0.04127 | 0.067668 | -123.976519 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| Isoconazole nitrate | 1 | 50.0 | Sigma | I0380000 | 479.1 | 24168-96-5 | 159968 | 5.3 | 6 | 93.1 | 1-[2-(2,4-dichlorophenyl)-2-[(2,6-dichlorophenyl)methoxy]ethyl]imidazole;nitric acid | C1=CC(=C(C(=C1)Cl)COC(CN2C=CN=C2)C3=C(C=C(C=C3)Cl)Cl)Cl | 4.474 | 4.070 to 4.910 | 0.06804 | 0.06673 to 0.06938 | 0.015208 | -106.457364 | 1.194 | 0.9312 to 1.530 | 0.04691 | 0.04326 to 0.05098 | 0.039288 | -132.784689 | 4.38 | 2.796 to 6.731 | 0.05519 | 0.04903 to 0.06203 | 0.0126 | -100.143905 | NaN | NaN | NaN |
| Itraconazole | 4 | NaN | sigma | I6657-100MG | 705.6 | 84625-61-6 | 3793 | 5.7 | 11 | 101 | 2-butan-2-yl-4-[4-[4-[4-[[2-(2,4-dichlorophenyl)-2-(1,2,4-triazol-1-ylmethyl)-1,3-dioxolan-4-yl]methoxy]phenyl]piperazin-1-yl]phenyl]-1,2,4-triazol-3-one | CCC(C)N1C(=O)N(C=N1)C2=CC=C(C=C2)N3CCN(CC3)C4=CC=C(C=C4)OCC5COC(O5)(CN6C=NC=N6)C7=C(C=C(C=C7)Cl)Cl | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| ketoconazole | 1 | NaN | sigma | PHR1385-1G | 531.4 | 65277-42-1 | 456201 | 4.3 | 7 | 69.1 | 1-[4-[4-[[(2R,4S)-2-(2,4-dichlorophenyl)-2-(imidazol-1-ylmethyl)-1,3-dioxolan-4-yl]methoxy]phenyl]piperazin-1-yl]ethanone | CC(N1CCN(C2=CC=C(OC[C@@H]3O[C@@](CN4C=CN=C4)(C5=CC=C(Cl)C=C5Cl)OC3)C=C2)CC1)=O | 68.62 | 57.93 to 81.50 | 0.07912 | 0.07410 to 0.08472 | 0.001153 | -111.491569 | 5.534 | 4.902 to 6.237 | 0.03371 | 0.03267 to 0.03480 | 0.006091 | -111.630467 | 19.32 | 8.512 to 42.90 | 0.03213 | 0.02636 to 0.03993 | 0.001663 | -93.577951 | NaN | NaN | NaN |
| Letrozole | -- | NaN | sigma | L6545-10MG | 285.3 | 112809-51-5 | 3902 | 2.7 | 3 | 78.3 | 4-[(4-cyanophenyl)-(1,2,4-triazol-1-yl)methyl]benzonitrile | C1=CC(=CC=C1C#N)C(C2=CC=C(C=C2)C#N)N3C=NC=N3 | 2.161 | 1.944 to 2.396 | 0.04028 | 0.03954 to 0.04102 | 0.01864 | -126.423264 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| Medetomidine HCl | 0 | NaN | sigma | ADV465749602-25MG | 236.7 | 86347-15-1 | 68601 | 3.1 | 2 | 28.7 | 5-[1-(2,3-dimethylphenyl)ethyl]-1H-imidazole;hydrochloride | CC1=C(C(=CC=C1)C(C)C2=CN=CN2)C | 0.5987 | 0.3874 to 0.8632 | 0.07613 | 0.07211 to 0.08022 | 0.127159 | -94.137 | 2.236 | 1.955 to 2.551 | 0.0414 | 0.04013 to 0.04272 | 0.018515 | -117.533625 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| Miconazole | 1 | NaN | sigma | PHR1618-1G | 416.13 | 22916-47-8 | 4189 | 5.3 | 6 | 27 | 1-[2-(2,4-dichlorophenyl)-2-[(2,4-dichlorophenyl)methoxy]ethyl]imidazole | C1=CC(=C(C=C1Cl)Cl)COC(CN2C=CN=C2)C3=C(C=C(C=C3)Cl)Cl | 2.327 | 1.839 to 2.963 | 0.06301 | 0.05757 to 0.06936 | 0.027078 | -127.403972 | 2.577 | 1.850 to 3.654 | 0.0251 | 0.02184 to 0.02942 | 0.00974 | -124.784472 | 1.591 | 1.142 to 2.213 | 0.05283 | 0.04780 to 0.05844 | 0.033206 | -115.372418 | NaN | NaN | NaN |
| Miconazole impurity H | 0 | NaN | Toronto Research Chemicals | TRC-M342490-100MG | 347.24 | 181931-30-6 | 76334268 | 4.7 | 6 | 27 | 1-[2-(2,4-dichlorophenyl)-2-phenylmethoxyethyl]imidazole | C1=CC=C(C=C1)COC(CN2C=CN=C2)C3=C(C=C(C=C3)Cl)Cl | 2.391 | 2.169 to 2.634 | 0.05972 | 0.05855 to 0.06090 | 0.024977 | -120.599645 | 2.242 | 1.866 to 2.681 | 0.03092 | 0.02953 to 0.03238 | 0.013791 | -127.824378 | 1.955 | 1.559 to 2.421 | 0.05041 | 0.04846 to 0.05239 | 0.025785 | -105.808293 | NaN | NaN | NaN |
| miconazole impurity I | 0 | NaN | sigma | PHR3562-100MG | 444.7 | 24169-00-4 | NaN | 4.7 | 6 | 27 | NaN | C1=CC=C(C(=C1)COC(CN2C=CN=C2)C3=C(C=C(C=C3)Cl)Cl)Cl | 1.806 | 1.406 to 2.316 | 0.06284 | 0.05857 to 0.06741 | 0.034795 | -110.029344 | 1.03 | 0.8226 to 1.276 | 0.02736 | 0.02600 to 0.02878 | 0.026563 | -134.322179 | 3.248 | 2.469 to 4.228 | 0.05374 | 0.05048 to 0.05718 | 0.016546 | -109.512667 | NaN | NaN | NaN |
| oteseconazole | -- | NaN | fisher | 50-197-0001 | 527.4 | 1340593-59-0 | 77050711 | 4.2 | 8 | 86 | (2R)-2-(2,4-difluorophenyl)-1,1-difluoro-3-(tetrazol-1-yl)-1-[5-[4-(2,2,2-trifluoroethoxy)phenyl]pyridin-2-yl]propan-2-ol | O[C@@](CN1N=NN=C1)(C2=CC=C(F)C=C2F)C(F)(F)C3=NC=C(C4=CC=C(OCC(F)(F)F)C=C4)C=C3 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| Oxiconazole Nitrate | 0 | NaN | sigma | SML1474-10MG | 492.1 | 64211-46-7 | 9556529 | 6.1 | 6 | 106 | (Z)-1-(2,4-dichlorophenyl)-N-[(2,4-dichlorophenyl)methoxy]-2-imidazol-1-ylethanimine;nitric acid | C1=CC(=C(C=C1Cl)Cl)CON=C(CN2C=CN=C2)C3=C(C=C(C=C3)Cl)Cl | 1.418 | 1.222 to 1.639 | 0.05771 | 0.05602 to 0.05943 | 0.040698 | -84.665223 | 2.808 | 2.233 to 3.508 | 0.02586 | 0.02452 to 0.02726 | 0.009209 | -124.116556 | 5.913 | 3.952 to 9.082 | 0.04506 | 0.03817 to 0.05447 | 0.00762 | -121.296093 | NaN | NaN | NaN |
| Propiconazole | -- | NaN | sigma | 45642-250MG | 342.22 | 60207-90-1 | 43234 | 3.5 | 5 | 49.2 | 1-[[2-(2,4-dichlorophenyl)-4-propyl-1,3-dioxolan-2-yl]methyl]-1,2,4-triazole | CCCC1COC(O1)(CN2C=NC=N2)C3=C(C=C(C=C3)Cl)Cl | 25.14 | 23.40 to 27.02 | 0.04522 | 0.04431 to 0.04615 | 0.001799 | -126.470898 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | 64.18 | 49.21 to 84.04 | 0.02729 | 0.02480 to 0.03018 | 0.000425 | -130.325326 | NaN | NaN | NaN |
| pyrazole, 3(5)-phenyl-1H--pyrazol-5-yl (4-phenyl-1H-pyrazol-5-amine) | 0 | NaN | sigma | CIAH98ABF429-1G | 159.19 | 5591-70-8 | 79703 | 1.5 | 1 | 54.7 | 4-phenyl-1H-pyrazol-5-amine | C1=CC=C(C=C1)C2=C(NN=C2)N | 4.404 | 4.144 to 4.677 | 0.05356 | 0.05297 to 0.05415 | 0.012162 | -124.381394 | 74.07 | 64.95 to 84.51 | 0.03709 | 0.03553 to 0.03874 | 0.000501 | -118.905445 | 190.9 | 87.93 to 469.0 | 0.01253 | 0.009160 to 0.01933 | 0.000066 | -126.119359 | NaN | NaN | NaN |
| StemRegenin 1 | -- | NaN | sigma | 182706-5MG | 428.5 | 1227633-49-9 | 46199207 | 5.4 | 6 | 104 | 4-[2-[[2-(1-benzothiophen-3-yl)-9-propan-2-ylpurin-6-yl]amino]ethyl]phenol | CC(C)N1C=NC2=C(N=C(N=C21)C3=CSC4=CC=CC=C43)NCCC5=CC=C(C=C5)O | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| Terconazole | 3 | NaN | sigma | PHR3247-500MG | 532.46 | 67915-31-5 | 441383 | 4.8 | 8 | 64.9 | 1-[4-[[(2R,4S)-2-(2,4-dichlorophenyl)-2-(1,2,4-triazol-1-ylmethyl)-1,3-dioxolan-4-yl]methoxy]phenyl]-4-propan-2-ylpiperazine | CC(N1CCN(C2=CC=C(OC[C@@H]3O[C@@](CN4N=CN=C4)(C5=CC=C(Cl)C=C5Cl)OC3)C=C2)CC1)C | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| Tioconazole | 0 | NaN | sigma | PHR2808-400MG | 387.7 | 65899-73-2 | 5482 | 5.3 | 6 | 55.3 | 1-[2-[(2-chlorothiophen-3-yl)methoxy]-2-(2,4-dichlorophenyl)ethyl]imidazole | C1=CC(=C(C=C1Cl)Cl)C(CN2C=CN=C2)OCC3=C(SC=C3)Cl | 1.234 | 0.8806 to 1.720 | 0.06641 | 0.06031 to 0.07311 | 0.053817 | -105.225736 | 1.772 | 1.517 to 2.073 | 0.03302 | 0.03124 to 0.03496 | 0.018634 | -136.043211 | 3.633 | 3.178 to 4.157 | 0.05764 | 0.05495 to 0.06055 | 0.015866 | -145.215004 | NaN | NaN | NaN |
| TNP | -- | NaN | sigma | T3955-5MG | 443.4 | 519178-28-0 | 16760513 | 4.4 | 6 | 124 | 6-N-[(4-nitrophenyl)methyl]-2-N-[[3-(trifluoromethyl)phenyl]methyl]-7H-purine-2,6-diamine | C1=CC(=CC(=C1)C(F)(F)F)CNC2=NC3=C(C(=N2)NCC4=CC=C(C=C4)[N+](=O)[O-])NC=N3 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| trans-2-​(2,​4-​Dichlorophenyl)​-​2-​(1H-​imidazol-​1-​ylmethyl)​-​1,​3-​dioxolane-​4-​methanol | 0 | NaN | Toronto Research Chemicals | TRC-D431560-10MG | 329.2 | 61441-65-4 | 794635 | 2.6 | 4 | 56.5 | [(2R,4R)-2-(2,4-dichlorophenyl)-2-(imidazol-1-ylmethyl)-1,3-dioxolan-4-yl]methanol | OC[C@H]1O[C@@](CN2C=CN=C2)(C3=CC=C(Cl)C=C3Cl)OC1 | 83.01 | 72.84 to 94.60 | 0.03975 | 0.03805 to 0.04156 | 0.000479 | -107.505877 | 6.093 | 5.315 to 6.972 | 0.03754 | 0.03619 to 0.03895 | 0.006161 | -114.673547 | 147.3 | 125.5 to 173.4 | 0.04805 | 0.04514 to 0.05130 | 0.000326 | -126.297168 | NaN | NaN | NaN |
| voriconazole | 0 | NaN | sigma | AMBH97F043C0-1G | 349.31 | 188416-29-7 | 71616 | 1.5 | 5 | 76.7 | (2R,3S)-2-(2,4-difluorophenyl)-3-(5-fluoropyrimidin-4-yl)-1-(1,2,4-triazol-1-yl)butan-2-ol | C[C@@H](C1=NC=NC=C1F)[C@@](O)(C2=CC=C(F)C=C2F)CN3N=CN=C3 | 43.77 | 39.28 to 48.72 | 0.04167 | 0.04042 to 0.04296 | 0.000952 | -104.884897 | 116.5 | 86.87 to 156.9 | 0.01591 | 0.01428 to 0.01785 | 0.000137 | -132.654124 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| IB-MECA | -- | NaN | Aaron Chemicals | AR23-1433637-3-1 | 510.29 | 152918-18-8 | 123683 | 0.9 | 5 | 134 | (2S,3S,4R,5R)-3,4-dihydroxy-5-[6-[(3-iodophenyl)methylamino]purin-9-yl]-N-methyloxolane-2-carboxamide | O=C([C@H]1O[C@@H](N2C=NC3=C(N(C4=CC=CC(I)=C4)C)N=CN=C23)[C@H](O)[C@@H]1O)NC | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| triazole, 1H-1,2,3- (1-(Rufinamide;2,6-Difluorobenzyl)-1H-1,2,3-triazole-4-carboxamide) | -- | NaN | sigma | 333662-1G | 69.07 | 288-36-8 | 67516 | -0.3 | 0 | 73.8 | 2H-triazole | C1=NNN=C1 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| (1-Methyl-1H-imidazol-2-yl)(phenyl)methanol | -- | NaN | sigma | CBR01328-1G | 188.23 | 30517-60-3 | 2859379 | 0.9 | 2 | 38 | (1-methylimidazol-2-yl)-phenylmethanol | CN1C=CN=C1C(C2=CC=CC=C2)O | 1218 | 711.5 to 2785 | 0.09479 | 0.06487 to 0.1847 | 0.000078 | -119.093 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| (4-fluorophenyl)(1-methyl-1H-imidazol-2-yl)methanol | -- | NaN | ChemBridge | 4001464 | 206.22 | 122155-26-4 | 11637052 | 1 | 2 | 38 | (4-fluorophenyl)-(1-methylimidazol-2-yl)methanol | CN1C=CN=C1C(C2=CC=C(C=C2)F)O | 1384 | 919.6 to 2426 | 0.1214 | 0.08983 to 0.1910 | 0.000088 | -110.67739 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| [2-(1H-benzimidazol-2-yl)ethyl]ethylamine dihydrochloride | -- | NaN | ChemBridge | 4010707 | 262.18 | NaN | 44118427 | NaN | 4 | 40.7 | 2-(1H-benzimidazol-2-yl)-N-ethylethanamine;dihydrochloride | CCNCCC1=NC2=CC=CC=C2N1 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| {[2-Chloro-6-(1H-imidazol-1-ylmethyl)-3-pyridinyl]oxy}acetic acid | -- | NaN | sigma | PH016863-50MG | 267.67 | 105277-92-7 | 125180271 | 1.1 | 5 | 77.2 | {[2-Chloro-6-(1H-imidazol-1-ylmethyl)-3-pyridinyl]oxy}acetic acid | O=C(O)COC1=CC=C(CN2C=CN=C2)N=C1Cl | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| 1-(2,4-dichlorophenyl)-2-(1H-imidazol-1-yl)ethan-1-one | 0 | NaN | AstaTech | A51084 | 255.1 | 46503-52-0 | 32232 | 2.8 | 3 | 34.9 | 1-(2,4-dichlorophenyl)-2-imidazol-1-ylethanone | C1=CC(=C(C=C1Cl)Cl)C(=O)CN2C=CN=C2 | 15.22 | 14.10 to 16.41 | 0.05988 | 0.05895 to 0.06082 | 0.003934 | -105.316741 | 13.59 | 10.03 to 18.20 | 0.02902 | 0.02680 to 0.03141 | 0.002135 | -129.2957 | 280.5 | 222.0 to 359.1 | 0.04019 | 0.03598 to 0.04550 | 0.000143 | -118.261991 | NaN | NaN | NaN |
| 1-(2,4-Dichlorophenyl)-2-imidazol-1-yl-ethanone o-allyloxime | 0 | NaN | sigma | MAN238929855-500MG | 310.2 | 928209-03-4 | 45790785 | 4 | 6 | 39.4 | (Z)-1-(2,4-dichlorophenyl)-2-imidazol-1-yl-N-prop-2-enoxyethanimine | C=CCON=C(CN1C=CN=C1)C2=C(C=C(C=C2)Cl)Cl | 0.3666 | 0.2752 to 0.4762 | 0.05547 | 0.05368 to 0.05729 | 0.151309 | -98.866692 | 4.241 | 3.375 to 5.297 | 0.02828 | 0.02663 to 0.03004 | 0.006668 | -123.872758 | 37.12 | 29.67 to 46.45 | 0.0465 | 0.04321 to 0.05015 | 0.001253 | -119.867759 | NaN | NaN | NaN |
| 1-(2,4-dichlorophenyl)-2-imidazol-1-ylethanol | 0 | NaN | sigma | CDS003858-250MG | 257.12 | 24155-42-8 | 32238 | 2.6 | 3 | 38 | 1-(2,4-dichlorophenyl)-2-imidazol-1-ylethanol | C1=CC(=C(C=C1Cl)Cl)C(CN2C=CN=C2)O | 10.62 | 10.15 to 11.11 | 0.06289 | 0.06227 to 0.06351 | 0.005922 | -121.869463 | 14.78 | 12.82 to 17.01 | 0.03792 | 0.03643 to 0.03949 | 0.002566 | -116.762562 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| 1-(3,6-dibromo-9H-carbazol-9-yl)-3-(4,5-diphenyl-1H-imidazol-1-yl)-2-propanol | -- | NaN | ChemBridge | 5602545 | 601.3 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | N(CC(O)CN1C=NC(C2=CC=CC=C2)=C1C1C=CC=CC=1)1C2=CC=C(C=C2C2=CC(Br)=CC=C21)Br | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| 1-(4-CHLOROPHENYL)-2-((5,6-DIMETHYL-1H-BENZIMIDAZOL-2-YL)THIO)ETHANONE | -- | NaN | sigma | R601322-1EA | 330.839 | 394221-21-7 | NaN | 5.1 | 4 | 71 | NaN | CC1=C(C)C=C2N=C(SCC(C3=CC=C(Cl)C=C3)=O)NC2=C1 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| 1-(4-Chlorophenyl)imidazole | 0 | NaN | sigma | CDS003753-250MG | 178.62 | 51581-54-5 | 142859 | 2.3 | 1 | 17.8 | 1-(4-chlorophenyl)imidazole | C1=CC(=CC=C1N2C=CN=C2)Cl | 0.7121 | 0.4875 to 1.030 | 0.05813 | 0.05268 to 0.06400 | 0.081632 | -103.009321 | 10.28 | 8.061 to 13.16 | 0.03186 | 0.02912 to 0.03505 | 0.003099 | -116.580635 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| 1-(methoxymethyl)-2-phenyl-1H-imidazole | -- | NaN | Specs | AM-814/41093744 | 188.23 | NaN | NaN | 1.6 | 3 | 27 | NaN | COCN1C=CN=C1C2=CC=CC=C2 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| 1-[2-([1,1’-biphenyl]-4-yloxy)ethyl]-1H-imidazole | 0 | NaN | sigma | T159549-100MG | 264.32 | 107352-52-3 | 2995330 | 3.5 | 5 | 27 | 1-[2-(4-phenylphenoxy)ethyl]imidazole | C1=CC=C(C=C1)C2=CC=C(C=C2)OCCN3C=CN=C3 | 21.76 | 20.38 to 23.20 | 0.06426 | 0.06337 to 0.06517 | 0.002953 | -94.929255 | 2.841 | 2.521 to 3.195 | 0.03882 | 0.03767 to 0.04000 | 0.013664 | -112.811379 | 19.92 | 15.48 to 25.50 | 0.03824 | 0.03592 to 0.04068 | 0.00192 | -117.381924 | NaN | NaN | NaN |
| 1-[2-(2-tert-butyl-4-chlorophenoxy)ethyl]imidazole oxalate | 1 | NaN | ChemBridge | 7006357 | 368.81 | NaN | 2922829 | NaN | 6 | 102 | 1-[2-(2-tert-butyl-4-chlorophenoxy)ethyl]imidazole;oxalic acid | CC(C)(C)C1=C(C=CC(=C1)Cl)OCCN2C=CN=C2 | 1.064 | 0.9056 to 1.240 | 0.05583 | 0.05441 to 0.05726 | 0.052472 | -130.094738 | 1.989 | 1.615 to 2.456 | 0.03877 | 0.03588 to 0.04205 | 0.019492 | -117.525303 | 25.9 | 19.24 to 34.67 | 0.05337 | 0.04934 to 0.05768 | 0.002061 | -113.260361 | NaN | NaN | NaN |
| 1-[2-(2,4-Dichlorophenoxy)ethyl]-1H-imidazole | 1 | NaN | ChemBridge | 5467030 | 257.11 | 112736-85-3 | 759758 | 2.9 | 4 | 27 | 1-[2-(2,4-dichlorophenoxy)ethyl]imidazole | C1=CC(=C(C=C1Cl)Cl)OCCN2C=CN=C2 | 0.8268 | 0.6901 to 0.9801 | 0.06691 | 0.06516 to 0.06868 | 0.080926 | -121.41049 | 2.021 | 1.561 to 2.638 | 0.04483 | 0.04057 to 0.04992 | 0.022182 | -126.497222 | 164.2 | 136.4 to 198.5 | 0.06085 | 0.05645 to 0.06588 | 0.000371 | -138.86818 | NaN | NaN | NaN |
| 1-[4-(2,4-dichlorophenoxy)butyl]-1H-imidazole | 0 | NaN | ChemBridge | 5576273 | 285 | NaN | NaN | 3.79 | 6 | 27 | 1-[4-(2,4-dichlorophenoxy)butyl]-1H-imidazole | ClC1=CC=C(OCCCCN2C=CN=C2)C(Cl)=C1 | 7.994 | 7.266 to 8.788 | 0.06292 | 0.06167 to 0.06418 | 0.007871 | -117.401992 | 1.219 | 0.9508 to 1.544 | 0.04606 | 0.04337 to 0.04892 | 0.037785 | -127.743528 | 34.38 | 30.37 to 38.87 | 0.04666 | 0.04511 to 0.04826 | 0.001357 | -120.293207 | NaN | NaN | NaN |
| 1-[5-(2,4-Dichlorophenoxy)pentyl]-1h-Imidazole | 0 | NaN | ChemBridge | 5532749 | 299.2 | NaN | 2850473 | 4.31 | 7 | 27 | 1-[5-(2,4-dichlorophenoxy)pentyl]-1H-imidazole | ClC1=CC=C(OCCCCCN2C=CN=C2)C(Cl)=C1 | 6.384 | 5.945 to 6.852 | 0.06704 | 0.06608 to 0.06801 | 0.010501 | -130.562959 | 0.8255 | 0.6604 to 1.017 | 0.04309 | 0.04114 to 0.04513 | 0.052199 | -130.534714 | 9.021 | 7.772 to 10.45 | 0.04614 | 0.04431 to 0.04804 | 0.005115 | -135.180523 | NaN | NaN | NaN |
| 1-4-(4-Chlorophenyl)-2-hydroxylbutyl]imidazole | 0 | NaN | sigma | AABH97CE7655-1G | 250.73 | 67085-11-4 | 10955994 | 2.3 | 5 | 38 | 4-(4-chlorophenyl)-1-imidazol-1-ylbutan-2-ol | C1=CC(=CC=C1CCC(CN2C=CN=C2)O)Cl | 90.17 | 82.57 to 98.49 | 0.05884 | 0.05709 to 0.06067 | 0.000653 | -100.867329 | 30.88 | 26.02 to 36.76 | 0.03447 | 0.03232 to 0.03686 | 0.001116 | -121.461518 | 183.2 | 166.1 to 202.3 | 0.0485 | 0.04654 to 0.05061 | 0.000265 | -116.083887 | NaN | NaN | NaN |
| 1-Aminobenzotriazole | -- | NaN | sigma | A3940-50MG | 134.14 | 1614-12-6 | 1367 | 0.9 | 0 | 56.7 | benzotriazol-1-amine | C1=CC=C2C(=C1)N=NN2N | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | 11.98 | 4.305 to 29.99 | 0.004175 | 0.003383 to 0.005105 | 0.000348 | -135.030031 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| 1-Benzylimidazole | 0 | NaN | sigma | 116416-5G | 158.2 | 4238-71-5 | 77918 | 1.6 | 2 | 17.8 | 1-benzylimidazole | C1=CC=C(C=C1)CN2C=CN=C2 | 0.6909 | 0.4845 to 0.9818 | 0.07318 | 0.06597 to 0.08119 | 0.10592 | -101.044063 | 88.86 | 69.28 to 115.3 | 0.03492 | 0.03137 to 0.03931 | 0.000393 | -124.438891 | 240.1 | 201.9 to 287.4 | 0.03745 | 0.03463 to 0.04074 | 0.000156 | -138.609346 | NaN | NaN | NaN |
| 1-Butylimidazole | 0 | NaN | sigma | 348414-25G | 124.18 | 4316-42-1 | 61347 | 1.2 | 3 | 17.8 | 1-butylimidazole | CCCCN1C=CN=C1 | 1.957 | 1.674 to 2.272 | 0.06195 | 0.06050 to 0.06341 | 0.031656 | -117.579467 | 83.81 | 69.18 to 101.6 | 0.03927 | 0.03674 to 0.04210 | 0.000469 | -102.811421 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| 1-Methylimidazole | -- | NaN | sigma | M50834-100G | 82.1 | 616-47-7 | 1390 | -0.1 | 0 | 17.8 | 1-methylimidazole | CN1C=CN=C1 | 188.6 | 158.6 to 225.2 | 0.06303 | 0.05857 to 0.06816 | 0.000334 | -121.498455 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| 1-Vinylimidazole | ? | NaN | sigma | 235466-25G | 94.11 | 1072-63-5 | 66171 | 0.5 | 1 | 17.8 | 1-ethenylimidazole | C=CN1C=CN=C1 | 109.3 | 97.64 to 122.5 | 0.0555 | 0.05328 to 0.05787 | 0.000508 | -112.111133 | 185.6 | 148.7 to 233.4 | 0.02485 | 0.02266 to 0.02749 | 0.000134 | -116.976978 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| 2-((1-BENZOYL-1H-BENZIMIDAZOL-2-YL)THIO)-1-(4-CHLOROPHENYL)ETHANOL | -- | NaN | sigma | R686263-1EA | 408.91 | 883813-15-8 | NaN | 5.3 | 5 | 80.4 | NaN | ClC1=CC=C(C(O)CSC2=NC3=CC=CC=C3N2C(C4=CC=CC=C4)=O)C=C1 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| 2-((1-ETHYL-1H-BENZIMIDAZOL-2-YL)THIO)-N'-(4-PROPOXYBENZYLIDENE)ACETOHYDRAZIDE | -- | NaN | sigma | R654116-1EA | 396.515 | 315216-01-4 | NaN | 4.4 | 9 | 93.8 | NaN | O=C(NN=CC1=CC=C(OCCC)C=C1)CSC2=NC3=CC=CC=C3N2CC | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| 2-(1H-benzimidazol-1-yl)propanoic acid hydrochloride | -- | NaN | ChemBridge | 4001990 | 226.66 | 1095080-29-7 | 18560661 | NaN | 2 | 55.1 | NaN | CC(C(=O)O)N1C=NC2=CC=CC=C21 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| 2-(3-iodophenyl)-4,5-bis(4-phenoxyphenyl)-1H-imidazole | -- | NaN | ChemBridge | 5472428 | 606.5 | NaN | 2847552 | 8.8 | 7 | 47.1 | 2-(3-iodophenyl)-4,5-bis(4-phenoxyphenyl)-1H-imidazole | C1=CC=C(C=C1)OC2=CC=C(C=C2)C3=C(N=C(N3)C4=CC(=CC=C4)I)C5=CC=C(C=C5)OC6=CC=CC=C6 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| 2-[(1H-benzimidazol-2-ylmethyl)thio]ethanol hydrochloride | -- | NaN | ChemBridge | 4001608 | 244.74 | NaN | 47000584 | NaN | 4 | 74.2 | 2-(1H-benzimidazol-2-ylmethylsulfanyl)ethanol;hydrochloride | C1=CC=C2C(=C1)NC(=N2)CSCCO | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| 1H-1,2,4-Triazole | -- | NaN | sigma | T46108-25G | 69.07 | 288-88-0 | 9257 | -0.6 | 0 | 41.6 | 1H-1,2,4-triazole | C1=NC=NN1 | 283.1 | 259.6 to 309.3 | 0.07079 | 0.06788 to 0.07395 | 0.00025 | -111.232007 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| 2-{1-[2-(4-bromophenoxy)ethyl]-1H-benzimidazol-2-yl}-1-(4-chlorophenyl)vinyl 4-chlorobenzoate | 3 | NaN | ChemBridge | 5530822 | 608.3 | NaN | 5340274 | 8.5 | 9 | 53.4 | NaN | C1(N(CCOC2C=CC(=CC=2)Br)C2=C(C=CC=C2)N=1)/C=C(\C1C=CC(=CC=1)Cl)/OC(=O)C1C=CC(=CC=1)Cl | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| 2-{4-[(4-chlorobenzyl)oxy]-3-iodo-5-methoxyphenyl}-4,5-diphenyl-1H-imidazole acetate | -- | NaN | ChemBridge | 5850472 | 592.9 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | N1C(C2=CC=CC=C2)=C(NC=1C1C=C(OC)C(=C(I)C=1)OCC1=CC=C(C=C1)Cl)C1=CC=CC=C1 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| TRICLABENDAZOLE (CPD000466357) | -- | NaN | sigma | 32802-100MG | 359.66 | 68786-66-3 | 50248 | 5.7 | 3 | 63.2 | 6-chloro-5-(2,3-dichlorophenoxy)-2-methylsulfanyl-1H-benzimidazole | CSC1=NC2=CC(=C(C=C2N1)Cl)OC3=C(C(=CC=C3)Cl)Cl | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| 2-ET-5-HO-4-(1-HYDROXY-2-(1-METHYL-1H-BENZIMIDAZOL-2-YL)VINYL)PHENYL PIVALATE | -- | NaN | sigma | L142263-10MG | 394.475 | 308295-24-1 | NaN | 5.3 | 6 | 84.6 | NaN | CN1C2=C(C=CC=C2)N=C1/C=C(C3=CC(CC)=C(OC(C(C)(C)C)=O)C=C3O)\O | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| SKF96365 | 0 | NaN | sigma | S7809-5MG | 402.91 | 130495-35-1 | 104955 | NaN | 10 | 45.5 | 1-[2-(4-methoxyphenyl)-2-[3-(4-methoxyphenyl)propoxy]ethyl]imidazole;hydrochloride | COC1=CC=C(C=C1)CCCOC(CN2C=CN=C2)C3=CC=C(C=C3)OC | 36.35 | 32.76 to 40.33 | 0.06764 | 0.06541 to 0.06998 | 0.001861 | -129.00503 | 1.183 | 0.9783 to 1.418 | 0.02986 | 0.02888 to 0.03086 | 0.025241 | -122.014985 | 4.116 | 3.283 to 5.138 | 0.04602 | 0.04355 to 0.04861 | 0.011181 | -131.720358 | NaN | NaN | NaN |
| 4-chlorobenzyl 2-(1H-imidazol-1-yl)-1-phenylethyl ether nitrate salt | 0 | NaN | sigma | PH013403-100MG | 375.815 | NaN | 97301912 | 3.5 | 6 | 27 | 1-[(2S)-2-[(4-chlorophenyl)methoxy]-2-phenylethyl]imidazole | ClC1=CC=C(CO[C@@H](C2=CC=CC=C2)CN3C=CN=C3)C=C1 | 7.458 | 6.616 to 8.374 | 0.05912 | 0.05787 to 0.06038 | 0.007927 | -102.782192 | 1.418 | 1.258 to 1.595 | 0.03513 | 0.03408 to 0.03620 | 0.024774 | -120.772982 | 9.346 | 7.496 to 11.59 | 0.04691 | 0.04464 to 0.04926 | 0.005019 | -116.778789 | NaN | NaN | NaN |
| Triflumizole | 0 | NaN | sigma | 32611-100MG | 345.75 | 68694-11-1 | 91699 | 4 | 6 | 39.4 | N-[4-chloro-2-(trifluoromethyl)phenyl]-1-imidazol-1-yl-2-propoxyethanimine | CCCOCC(=NC1=C(C=C(C=C1)Cl)C(F)(F)F)N2C=CN=C2 | 19.93 | 18.44 to 21.53 | 0.05479 | 0.05363 to 0.05598 | 0.002749 | -107.423293 | 7.322 | 5.090 to 10.27 | 0.01278 | 0.01180 to 0.01384 | 0.001745 | -123.587031 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| A112994; (cis-2-((1H-Imidazol-1-yl)methyl)-2-(2,4-dichlorophenyl)-1,3-dioxolan-4-yl)methyl 4-methylbenzenesulfonate | 0 | NaN | AmBeed | A112944 | 483.37 | 134071-44-6 | 10814675 | 4.6 | 7 | 88 | [(2R,4R)-2-(2,4-dichlorophenyl)-2-(imidazol-1-ylmethyl)-1,3-dioxolan-4-yl]methyl 4-methylbenzenesulfonate | O=S(C1=CC=C(C)C=C1)(OC[C@@H]2O[C@@](CN3C=CN=C3)(C4=CC=C(Cl)C=C4Cl)OC2)=O | 16.23 | 14.66 to 17.96 | 0.06659 | 0.06440 to 0.06889 | 0.004103 | -104.491654 | 3.359 | 2.536 to 4.353 | 0.02152 | 0.02037 to 0.02272 | 0.006407 | -131.496346 | 0.7773 | 0.5829 to 1.032 | 0.05261 | 0.04879 to 0.05666 | 0.067683 | -110.489605 | NaN | NaN | NaN |
| benzimidazole | -- | NaN | sigma | 194123-5G | 118.14 | 51-17-2 | 5798 | 1.3 | 0 | 28.7 | NaN | C1=CC=C2C(=C1)NC=N2 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| CBR00638; 2-[2-(1H-Imidazol-1-yl)ethyl]piperidine dihydrochloride | -- | NaN | chembridge | 4011850 | 252.18 | NaN | 45595302 | NaN | 3 | 29.8 | 2-(2-imidazol-1-ylethyl)piperidine;dihydrochloride | C1CCNC(C1)CCN2C=CN=C2 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| CDS017891; 4-([3-(1H-imidazol-1-yl)propyl]amino)-4-oxobutanoic acid | -- | NaN | sigma | CDS017891-25MG | 225.25 | NaN | 3132072 | -1 | 7 | 84.2 | 4-([3-(1H-Imidazol-1-Yl)Propyl]Amino)-4- Oxobutanoic Acid | C1=CN(C=N1)CCCNC(=O)CCC(=O)O | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| Chloro-IB-MECA | -- | NaN | sigma | C277-5MG | 544.7 | 163042-96-4 | 3035850 | 1.9 | 5 | 134 | (2S,3S,4R,5R)-5-[2-chloro-6-[(3-iodophenyl)methylamino]purin-9-yl]-3,4-dihydroxy-N-methyloxolane-2-carboxamide | O=C([C@H]1O[C@@H](N2C=NC3=C(N(C4=CC=CC(I)=C4)C)N=C(Cl)N=C23)[C@H](O)[C@@H]1O)NC | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| Climbazole | 0 | NaN | sigma | 36127-100MG | 292.76 | 38083-17-9 | 37907 | 3.7 | 5 | 44.1 | 1-(4-chlorophenoxy)-1-imidazol-1-yl-3,3-dimethylbutan-2-one | CC(C)(C)C(=O)C(N1C=CN=C1)OC2=CC=C(C=C2)Cl | 33.77 | 27.05 to 41.92 | 0.03368 | 0.03183 to 0.03566 | 0.000997 | -101.825702 | 15.82 | 11.72 to 20.94 | 0.01916 | 0.01798 to 0.02041 | 0.001211 | -118.298113 | 65.94 | 55.63 to 78.18 | 0.03584 | 0.03396 to 0.03787 | 0.000544 | -123.487372 | NaN | NaN | NaN |
| Clotrimazole | 0 | NaN | sigma | C6019-5G | 344.83 | 23593-75-1 | 2812 | 5 | 4 | 17.8 | 1-[(2-chlorophenyl)-diphenylmethyl]imidazole | C1=CC=C(C=C1)C(C2=CC=CC=C2)(C3=CC=CC=C3Cl)N4C=CN=C4 | 1.269 | 1.137 to 1.411 | 0.08107 | 0.07964 to 0.08252 | 0.063885 | -115.621328 | 2.627 | 2.255 to 3.049 | 0.03847 | 0.03705 to 0.03994 | 0.014644 | -126.412331 | 47.61 | 39.04 to 58.38 | 0.04503 | 0.04139 to 0.04930 | 0.000946 | -101.450811 | NaN | NaN | NaN |
| Econazole | 0 | NaN | sigma | Y0001236 | 381.7 | 27220-47-9 | 3198 | 5.5 | 6 | 27 | 1-[2-[(4-chlorophenyl)methoxy]-2-(2,4-dichlorophenyl)ethyl]imidazole | C1=CC(=CC=C1COC(CN2C=CN=C2)C3=C(C=C(C=C3)Cl)Cl)Cl | 7.879 | 7.295 to 8.506 | 0.05896 | 0.05780 to 0.06014 | 0.007483 | -107.713244 | 1.39 | 1.144 to 1.671 | 0.02638 | 0.02540 to 0.02739 | 0.018978 | -119.294229 | 1.914 | 1.499 to 2.445 | 0.05235 | 0.04853 to 0.05654 | 0.027351 | -122.687989 | NaN | NaN | NaN |
| Enilconazole | 0 | NaN | sigma | 32007-100MG | 297.2 | 35554-44-0 | 37175 | 3.8 | 6 | 27 | 1-[2-(2,4-dichlorophenyl)-2-prop-2-enoxyethyl]imidazole | C=CCOC(CN1C=CN=C1)C2=C(C=C(C=C2)Cl)Cl | 6.573 | 6.205 to 6.959 | 0.06131 | 0.06060 to 0.06204 | 0.009328 | -113.839926 | 2.453 | 2.170 to 2.766 | 0.03423 | 0.03324 to 0.03525 | 0.013954 | -119.652051 | 22.94 | 19.69 to 26.68 | 0.04684 | 0.04505 to 0.04869 | 0.002042 | -138.310747 | NaN | NaN | NaN |
| etaconazol | 0 | NaN | sigma | 45471-250MG | 328.19 | 71245-23-3 | 70541590 | 3.3 | 3 | 49.2 | 1-[2-(2,4-dichlorophenyl)-4-ethyl-1,3-dioxolan-2-yl]-1,2,4-triazole | CCC1COC(O1)(C2=C(C=C(C=C2)Cl)Cl)N3C=NC=N3 | 19.22 | 17.44 to 21.17 | 0.04706 | 0.04598 to 0.04817 | 0.002448 | -112.990141 | 73.29 | 57.76 to 92.91 | 0.01895 | 0.01756 to 0.02050 | 0.000259 | -120.33924 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| Flutrimazole | 0 | NaN | sigma | F0290000 | 346.4 | 119006-77-8 | 3401 | 4.6 | 4 | 17.8 | 1-[(2-fluorophenyl)-(4-fluorophenyl)-phenylmethyl]imidazole | C1=CC=C(C=C1)C(C2=CC=C(C=C2)F)(C3=CC=CC=C3F)N4C=CN=C4 | 1.289 | 1.133 to 1.459 | 0.07463 | 0.07300 to 0.07628 | 0.057898 | -97.751731 | 1.975 | 1.228 to 3.074 | 0.01481 | 0.01372 to 0.01594 | 0.007499 | -123.64964 | 97.47 | 73.72 to 130.1 | 0.0434 | 0.03876 to 0.04910 | 0.000445 | -127.878801 | NaN | NaN | NaN |
| Fosfluconazole | -- | NaN | sigma | AABH93DE0192-10MG | 386.25 | 194798-83-9 | 214356 | -0.6 | 7 | 128 | [2-(2,4-difluorophenyl)-1,3-bis(1,2,4-triazol-1-yl)propan-2-yl] dihydrogen phosphate | C1=CC(=C(C=C1F)F)C(CN2C=NC=N2)(CN3C=NC=N3)OP(=O)(O)O | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| Glasdegib (PF-04449913) maleate salt | -- | NaN | sigma | PZ0303-5MG | 490.51 | 1095173-27-5 | 25166913 | 2.4 | 3 | 96.8 | 1-[(2R,4R)-2-(1H-benzimidazol-2-yl)-1-methylpiperidin-4-yl]-3-(4-cyanophenyl)urea | O=C(NC1=CC=C(C#N)C=C1)N[C@H]2C[C@H](C3=NC4=CC=CC=C4N3)N(C)CC2 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| HC-030031 | -- | NaN | sigma | H4415-10MG | 355.4 | 349085-38-7 | 1150897 | 1.7 | 4 | 87.5 | 2-(1,3-dimethyl-2,6-dioxopurin-7-yl)-N-(4-propan-2-ylphenyl)acetamide | CC(C)C1=CC=C(C=C1)NC(=O)CN2C=NC3=C2C(=O)N(C(=O)N3C)C | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| Sulconazole Nitrate | 0 | NaN | sigma | 1623681-200MG | 460.8 | 61318-91-0 | 65495 | 6.1 | 6 | 109 | 1-[2-[(4-chlorophenyl)methylsulfanyl]-2-(2,4-dichlorophenyl)ethyl]imidazole;nitric acid | C1=CC(=CC=C1CSC(CN2C=CN=C2)C3=C(C=C(C=C3)Cl)Cl)Cl | 4.049 | 2.986 to 5.437 | 0.05377 | 0.04955 to 0.05841 | 0.01328 | -91.92801 | 1.516 | 1.388 to 1.651 | 0.02743 | 0.02695 to 0.02792 | 0.018094 | -130.243576 | 3.326 | 2.870 to 3.840 | 0.04339 | 0.04211 to 0.04471 | 0.013046 | -103.804696 | NaN | NaN | NaN |
| indazole | -- | NaN | sigma | I2401-1G | 118.14 | 271-44-3 | 9221 | 1.8 | 0 | 28.7 | 1H-indazole | C1=CC=C2C(=C1)C=NN2 | 1.845 | 1.476 to 2.241 | 0.03639 | 0.03571 to 0.03708 | 0.019724 | -125.729144 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| Liarozole dihydrochloride | 0 | NaN | Fisher | 27-051-0 | 345.227 | 1883548-96-6 | 71454 | 3.5 | 3 | 46.5 | 6-[(3-chlorophenyl)-imidazol-1-ylmethyl]-1H-benzimidazole;hydrochloride | C1=CC(=CC(=C1)Cl)C(C2=CC3=C(C=C2)N=CN3)N4C=CN=C4 | 1.462 | 1.261 to 1.688 | 0.06606 | 0.06455 to 0.06758 | 0.045185 | -105.500637 | 7.755 | 5.794 to 10.23 | 0.02142 | 0.02010 to 0.02280 | 0.002762 | -120.320989 | 11.5 | 9.470 to 14.11 | 0.05107 | 0.04628 to 0.05698 | 0.004441 | -118.820232 | NaN | NaN | NaN |
| Lomeguatrib | -- | NaN | sigma | SML0586-5MG | 326.17 | 192441-08-0 | 3025944 | 2 | 3 | 118 | 6-[(4-bromothiophen-2-yl)methoxy]-7H-purin-2-amine | C1=C(SC=C1Br)COC2=NC(=NC3=C2NC=N3)N | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| N-(1-(1-(4-CHLOROBENZYL)-1H-BENZIMIDAZOL-2-YL)ETHYL)-4-FLUOROBENZAMIDE | -- | NaN | sigma | R898023-1EA | 407.879 | 430451-95-9 | NaN | 5 | 5 | 46.9 | NaN | O=C(NC(C1=NC2=CC=CC=C2N1CC3=CC=C(Cl)C=C3)C)C4=CC=C(F)C=C4 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| NGP555 | 1 | NaN | AA BLOCKS | AA01EO3Y | 407.53 | 1304630-27-0 | 46853593 | 6.3 | 5 | 71 | N-(5-ethyl-2,4-dimethylphenyl)-4-[3-fluoro-4-(4-methylimidazol-1-yl)phenyl]-1,3-thiazol-2-amine | CCC1=CC(=C(C=C1C)C)NC2=NC(=CS2)C3=CC(=C(C=C3)N4C=C(N=C4)C)F | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | 5.862 | 3.337 to 11.53 | 0.02082 | 0.01572 to 0.03081 | 0.003552 | -130.103428 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| NITRIC ACID COMPOUND WITH [2-(2,4-DICHLOROPHENYL)-2-(1H-IMIDAZOL-1-YLMETHYL)-1,3-DIOXOLAN-4-YL]METHYL BENZOATE | 0 | NaN | sigma | R736635-10MG | 496.307 | 1263966-18-2 | NaN | 4.8 | 7 | 123 | NaN | O=C(OCC1OC(CN2C=CN=C2)(C3=CC=C(Cl)C=C3Cl)OC1)C4=CC=CC=C4 | 9.135 | 7.940 to 10.50 | 0.06301 | 0.06074 to 0.06536 | 0.006898 | -109.013935 | 4.283 | 3.532 to 5.163 | 0.02773 | 0.02646 to 0.02905 | 0.006474 | -116.619651 | 2.597 | 2.297 to 2.923 | 0.0462 | 0.04525 to 0.04715 | 0.01779 | -120.776954 | NaN | NaN | NaN |
| Ozagrel hydrochloride hydrate | 0 | NaN | sigma | O1385-5MG | 264.71 | 78712-43-3 | 6438130 | 1.6 | 4 | 56.1 | (E)-3-[4-(imidazol-1-ylmethyl)phenyl]prop-2-enoic acid;hydrochloride | C1=CC(=CC=C1CN2C=CN=C2)C=CC(=O)O | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | 613.1 | 346.6 to 1338 | 0.02715 | 0.01944 to 0.04660 | 0.000044 | -131.028044 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| Prochloraz | 0 | NaN | sigma | 45631-250MG | 376.67 | 67747-09-5 | 73665 | 4.6 | 6 | 47.4 | N-propyl-N-[2-(2,4,6-trichlorophenoxy)ethyl]imidazole-1-carboxamide | CCCN(CCOC1=C(C=C(C=C1Cl)Cl)Cl)C(=O)N2C=CN=C2 | 4.419 | 3.474 to 5.569 | 0.04791 | 0.04574 to 0.05014 | 0.010842 | -105.16085 | 1.901 | 1.593 to 2.253 | 0.01882 | 0.01827 to 0.01938 | 0.0099 | -131.581829 | 22.05 | 18.78 to 25.85 | 0.02588 | 0.02476 to 0.02705 | 0.001174 | -130.475052 | NaN | NaN | NaN |
| PTC-028 | -- | NaN | sigma | AMBH303C6AC6-25MG | 405.3 | 1782970-28-8 | 73427235 | 4.7 | 3 | 55.6 | 6-(5,6-difluoro-2-methylbenzimidazol-1-yl)-N-[4-(trifluoromethyl)phenyl]pyrazin-2-amine | Cc1nc2cc(F)c(F)cc2n1-c1cncc(Nc2ccc(cc2)C(F)(F)F)n1 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |
| Imidazole | 0 | NaN | sigma | I2399-100G | 68.08 | 288-32-4 | 795 | -0.1 | 0 | 28.7 | 1H-imidazole | C1=CN=CN1 | 42.79 | 37.75 to 48.33 | 0.06379 | 0.06253 to 0.06507 | 0.001491 | -110.607483 | 172.8 | 163.1 to 183.0 | 0.04461 | 0.04404 to 0.04518 | 0.000258 | -116.059518 | 878.5 | 793.2 to 972.9 | 0.05742 | 0.05569 to 0.05921 | 0.000065 | -132.431512 | NaN | NaN | NaN |
| fluconazole | -- | NaN | sigma | F8929-100MG | 306.27 | 86386-73-4 | NaN | 0.4 | 5 | 81.6 | NaN | NaN | 8.57 | 0.5415 to 61.95 | 0.02137 | 0.01510 to 0.03155 | 0.002494 | -87.841383 | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN | NaN |