

## Supplementary materials

Table S1. Key physicochemical parameters of the examined compounds obtained using the SwissADME server.

Compound	Formula	MW	No. heavy atoms	No. aromatic heavy atoms	Fraction Csp <sup>3</sup>	No. rotatable bonds	No. H-bond acceptors	No. H-bond donors	Molar refractivity
1	C <sub>22</sub> H <sub>30</sub> O <sub>6</sub>	390.47	28	0	0.68	3	6	2	104.48
2	C <sub>30</sub> H <sub>36</sub> O <sub>7</sub>	508.60	37	6	0.53	7	7	1	138.29
3	C <sub>30</sub> H <sub>36</sub> O <sub>7</sub>	508.60	37	6	0.53	6	7	1	138.67
4	C <sub>27</sub> H <sub>38</sub> O <sub>2</sub>	490.59	35	0	0.70	7	8	1	129.74
5	C <sub>26</sub> H <sub>36</sub> O <sub>7</sub>	460.56	33	0	0.69	7	7	1	123.42
6	C <sub>36</sub> H <sub>38</sub> O <sub>8</sub>	598.68	44	12	0.42	9	8	0	163.34

Table S2. Predicted lipophilicity of the examined compounds obtained using the SwissADME server.

Compound	TPSA	iLOGP	XLOGP	WLOGP	MLOGP	Silicos-IT GP	Consensus LogP
1	100.90	3.11	3.36	3.04	1.43	3.22	2.83
2	106.97	4.03	5.06	4.27	2.75	5.26	4.27
3	106.97	4.48	5.49	4.65	3.02	5.39	4.61
4	116.20	4.15	4.86	4.44	2.02	4.22	3.94
5	106.97	3.76	4.30	3.83	2.20	4.57	3.73
6	113.04	5.17	7.36	6.21	4.13	6.44	5.86

Table S3. Predicted water solubility of the examined compounds obtained using the SwissADME server.

Compound	ESOL log S	ESOL solubility [mg/mL]	ESOL solubility [mol/L]	ESOL class	Ali log S	Ali solubility [mg/mL]	Ali solubility [mol/L]	Ali class	Silico s-IT log S	Silicos-IT solubility [mg/mL]	Silicos-IT solubility [mol/L]	Silicos-IT class
1	-4.18	2.58e-02	6.61e-05	Moderately soluble	-5.16	2.72e-03	6.97e-06	Moderately soluble	-3.61	9.58e-02	2.45e-04	Soluble

2	-5.84	7.37e-04	1.45e-06	Modera tely soluble	-7.05	4.55e-05	8.95e-08	Poorly soluble	-6.68	1.07e-04	2.10e-07	Poorly soluble
3	-6.18	3.39e-04	6.67e-07	Poorly soluble	-7.49	1.63e-05	3.20e-08	Poorly soluble	-6.66	1.11e-04	2.19e-07	Poorly soluble
4	-5.48	1.62e-03	3.30e-06	Modera tely soluble	-7.03	4.53e-05	9.23e-08	Poorly soluble	-4.73	9.18e-03	1.87e-05	Modera tely soluble
5	-4.94	5.26e-03	1.14e-05	Modera tely soluble	-6.26	2.53e-04	5.50e-07	Poorly soluble	-5.01	4.54e-03	9.86e-06	Modera tely soluble
6	-7.80	9.57e-06	1.60e-08	Poorly soluble	-9.56	1.64e-07	2.74e-10	Poorly soluble	-8.94	6.84e-07	1.14e-09	Poorly soluble

Table S4. Predicted pharmacokinetics parameters of the examined compounds obtained by using the SwissADME server.

<b>Compound</b>	GI adsorption	BBB permeant	Pgp substrate	CYP1A2 inhibitor	CYP2C19 inhibitor	CYP2C9 inhibitor	CYP2D6 inhibitor	CYP3A4 inhibitor	Log Kp [cm/s]
1	High	No	Yes	No	No	No	No	Yes	-6.30
2	High	No	Yes	No	No	Yes	No	Yes	-5.81
3	High	No	Yes	No	No	Yes	No	Yes	-5.50
4	High	No	Yes	No	No	Yes	No	No	-5.84
5	High	No	Yes	No	No	Yes	No	No	-6.06
6	Low	No	Yes	No	No	Yes	No	Yes	-4.73

Table S5. Predicted drug-likeness, medicinal chemistry, and lead-likeness pharmacokinetic parameters of the examined compounds obtained by using the SwissADME server.

<b>Compound</b>	Lipinski # violations	Ghose # violations	Veber # violations	Egan # violations	Muegge # violations	Bioavai lability score	PAINS # alerts	Brenks # alerts	Leadlikeness # violations	Synthetic accessibil ity
1	0	0	0	0	0	0.56	1	1	1	5.23
2	1	3	0	0	1	0.56	1	2	2	5.92
3	1	3	0	0	1	0.56	1	2	2	5.82
4	0	2	0	0	0	0.56	1	2	2	5.99
5	0	0	0	0	0	0.56	1	2	2	5.89
6	1	4	0	1	1	0.56	1	2	3	6.19

Table S6. Predicted organ toxicity and toxicological endpoints activity of the examined compounds obtained using the ProTox-II server. (% probability)

Compound	Hepatotoxicity (% probability)	Carcinogenicity (% probability)	Immunotoxicity (% probability)	Mutagenicity (% probability)	Cytotoxicity (% probability)
1	Inactive (72)	Active (50)	Active (94)	Inactive (85)	Inactive (81)
2	Inactive (76)	Active (51)	Active (87)	Inactive (85)	Inactive (72)
3	Inactive (70)	Active (50)	Active (88)	Inactive (84)	Inactive (83)
4	Inactive (62)	Active (52)	Active (98)	Inactive (77)	Inactive (85)
5	Inactive (77)	Active (53)	Active (94)	Inactive (87)	Inactive (71)
6	Inactive (57)	Active (51)	Active (96)	Inactive (78)	Inactive (85)

Table S7. Toxicological pathways: nuclear receptor signaling pathways predicted for the examined compounds obtained using the ProTox-II server. (% probability)

Compound	Aryl Hydrocarbon Receptor (AhR)	Androgen Receptor (AR)	Androgen Receptor Ligand Binding Domain (AR- LBD)	Aromatase Membrane Potential (MMP)	Estrogen Receptor Alpha (ER)	Estrogen Receptor Ligand Binding Domain (ER-LBD)	Peroxisome Proliferator Activated Receptor Gamma (PPAR- Gamma)
1	Inactive (91)	Inactive (86)	Inactive (87)	Inactive (87)	Inactive (77)	Inactive (87)	Inactive (96)
2	Inactive (94)	Inactive (75)	Inactive (7)	Inactive (83)	Inactive (68)	Inactive (85)	Inactive (96)
3	Inactive (89)	Inactive (86)	Inactive (85)	Inactive (83)	Inactive (75)	Inactive (83)	Inactive (94)
4							
5	Inactive (97)	Inactive (74)	Inactive (80)	Inactive (82)	Inactive (73)	Inactive (89)	Inactive (97)
6	Inactive (86)	Inactive (86)	Inactive (82)	Inactive (82)	Inactive (72)	Inactive (78)	Inactive (95)

Table S8. Toxicological pathways: stress response pathways predicted for the compounds examined obtained using the ProTox-II server. (% probability)

Compound	Nuclear Factor (Erythroid-Derived 2- Like 2/Antioxidant Responsive Element) (nrf2/ARE)	Heat Shock Factor Response Element (HSE)	Mitochondrial Membrane Potential (MMP)	Phosphoprotein (Tumor Suppressor) p53	ATPase Family AAA Domain Containing Protein 5 (ATAD5)
----------	--	--	--	---	---

1	Inactive (76)	Inactive (76)	Inactive (58)	Inactive (93)	Inactive (84)
2	Inactive (84)	Inactive (84)	Inactive (56)	Inactive (90)	Inactive (90)
3	Inactive (84)	Inactive (84)	Inactive (52)	Inactive (89)	Inactive (85)
4	Inactive (74)	Inactive (74)	Active (52)	Inactive (84)	Inactive (86)
5	Inactive (76)	Inactive (76)	Active (50)	Inactive (95)	Inactive (93)
6	Inactive (74)	Inactive (74)	Active (53)	Inactive (86)	Inactive (85)

Table S9. Predicted acute toxicity of the examined compounds obtained using the StopTox server.

Compound	Inhalation Toxicity	Oral Toxicity	Dermal Toxicity	Eye Irritation and Corrosion	Skin Sensitization	Skin Irritation and Corrosion
1	No	No	No	No	No	No
2	No	No	No	No	No	No
3	No	No	No	No	No	No
4	No	No	No	No	No	No
5	No	No	No	No	No	No
6	No	No	No	No	Yes	No

Table S10. Predicted toxicity risks for the examined compounds obtained using the OSIRIS server.

Compound	Mutagenic Potential	Tumorigenic Potential	Irritant Potential	Reproductive Effectivity
1	Medium	Low	High	Low
2	Medium	Low	High	Low
3	Medium	Low	High	Low
4	Medium	Low	High	Low
5	Medium	Low	High	Low
6	Medium	Low	High	Low

Table S11. The molecular docking results of compounds **1-6** against target proteins.

Compound	Binding energy (kcal/mol)	Hydrogen bonds	Other bonds
<b>BCL-2</b>			
<b>1</b>	-9.50	ASP B: 70	GLU B: 111, PHE B: 112, GLY B: 104, ALA B: 108, ARG B: 105, LEU B: 96, PHE B: 63, TYR B: 67, MET B: 74, PHE B: 71
<b>2</b>	-10.46	LEU B: 160	VAL B: 107, PHE B: 63, GLY B: 104, GLU B: 58, PRO B: 163, GLY B: 162, TYR B: 161, SER A: 76, ARG A: 69, ALA A: 72, GLY B: 60, ALA B: 59, ASP B: 62

3	-10.22	LEU B: 160	PHE B: 63, TYR B: 67, ARG B: 66, ASP B: 62, GLU B: 58, PRO B: 163, TYR B: 161, GLY B: 162, SER A: 76, ARG A: 69, ALA A: 72, ALA B: 59, GLY B: 60, VAL B: 107
4	-10.28	TYR B: 161	ASN B:102, ARG A: 68, ARG A: 105, PHE B: 63, VAL B: 107, ARG B: 66, ALA B: 59, ASP B: 62, PRO B: 163, GLU B: 58, SER A: 76, ALA A: 72, GLYB: 104, LEU B: 160, TYR B: 67
5	-8.71	ASP B: 62	GLY B: 60, VAL B: 107, GLY B: 104, PHE B: 63, ARG B: 66, SER A: 76, LEU B: 160, PRO B: 163, TYR B: 161, GLU B: 58, ALA B: 59
6	-10.36	TYR B: 161	ALA A: 72, GLU B: 58, ALA B: 59, ASP B: 62, VAL B: 107, PHE B: 63, ARG B: 66, TYR B: 67, GLY B: 104, ARG B: 105, TRP B: 103, PRO B: 163, SER A: 76, SER A: 75
<b>BCL-XL</b>			
1	-10.42	-	PHE A: 105, TYR A: 101, ARG A: 100, ASP B: 133, ARG A: 103, ARG B: 132, GLU B: 129, ALA A: 104, PHE B: 131, LEU B: 130, PHE B: 105, ALA B: 141, ASN B: 136, GLY B: 138, PHE B: 97
2	-10.95	-	PHE B: 97, GLY B: 138, PHE B: 105, LEU B: 108, ASN B: 135, SER B: 106, LEU B: 130, GLU B: 129, ALA A: 104, ARG B: 139, ASP B: 133, TYR A: 101, PHE A: 97; PHE A: 105, TYR B: 101
3	-12.26	ARG A: 139, ASN A: 136	LEU A: 108, GLU A: 129, ALA A: 142, LEU A: 130, ARG A: 102, ARG A: 132, ALA B: 104, TYR B: 101, GLY A: 138, PHE A: 97, PHE A: 105, SER A: 106
4	-12.84	-	ARG B: 102, GLU B: 129, ALA A: 104, ASP B: 133, TYR A: 101, ASN B: 136, GLY B: 138, TYR B: 101, PHE B: 105, PHE B: 97, ALA B: 142, SER B: 106, LEU B: 108, LEU B: 130, ASP B: 107, PHE B: 146
5	-9.94	-	ASP A: 133, PHE B: 97, TYR B: 101, PHE B: 105, ASN A: 136, TYR A: 101, GLY A: 138, PHE A: 105, PHE A: 97, LEU A: 130, ALA A: 142, ARG A: 139, ALA B: 104, ARG B: 100
6	-11.25	-	GLU A: 96, ALA A: 93, TYR A: 195, VAL A: 141, PHE A: 191, GLY A: 138, PHE A: 97, TYR A: 101, ARG A: 139, ALA A: 142, ARG B: 139, ALA A: 104, PHE B: 105, PHE A: 105, ASN A: 136
<b>Caspase 3</b>			
1	-9.09	TYR A: 197, PRO B: 201	LYS A: 137, GLY B: 202, TYR B: 203, ALA B: 200, TYR A: 195, VAL A: 266, MET A: 268, GLY A: 125, THR A: 140, ARG A: 164, LEU A: 136, GLU A: 124, ASP A: 135
2	-9.63	ARG A: 164, TYR A: 197	TYR B: 197, TYR B: 195, VAL B: 266, ARG B: 164, CYS B: 264, VAL A: 266, CYS A: 264, PRO B: 201, TYR A: 195, THR A: 140, LEU A: 136, GLY A: 125, LYS A: 137, GLU A: 124, GLU A: 124, GLU B: 124, MET B: 268, PRO A: 201
3	-9.58	TYR A: 197	THR B: 140, LYS B: 137, TYR B: 197, LEU B: 136, PRO A: 201, ARG B: 164, CYS B: 264, VAL A: 266, GLU A: 124, VAL B: 266, ARG A: 164, CYS A: 264, GLY A: 125, LEU A: 136, TYR A: 195, THR A: 140, GLY B: 202, LYS A: 137, GLU B: 124, PRO B: 201, GLY B: 125
4	-11.86	ARG A:164, TYR B:197	THR A:140, GLY A: 125, GLU A: 124, GLU B: 124, LEU B: 136, LYS B: 137, ASP B: 135, GLY B: 125, TYR B: 195, THR B: 140, PRO A: 201, MET B: 268, ARG B: 164, CYS A: 264, VAL B: 266, CYS B: 264, VAL A: 266, PRO B: 201, TYR A: 195, TYR A: 197, LEU A: 136, LYS A: 137,
5	-8.39	ARG A: 164, CYS A: 264	LEU B: 136, THR B: 140, TYR B: 195, MET B: 268, TYR B: 197, PRO A: 201, VAL B: 266, VAL A: 266, PRO B: 201, ARG B: 164, TYR A: 197, GLU B: 124, LYS B: 137, GLU A: 124, GLY B: 125, ASP B: 135
6	-9.89	LYS B: 137	LEU A:136, GLY A: 125, CYS B: 264, TYR A: 197, PRO B: 201, VAL A: 266, ARG B: 164, ARG B: 164, VAL B: 266, ARG A: 164, CYS A: 264,

GLU A: 124, GLU B: 124, TYR B: 195, PRO A: 201, LEU B: 136, GLY A: 202, GLU A: 167, GLY B: 125			
<b>Caspase 9</b>			
1	-10.60	THRB: 181, PROB: 349	THRB: 179, ARGB: 178, HISB: 237, CYSB: 287, ARGB: 180, PHEB: 351, SERB: 361, PHEB: 348, GLYB: 350, GLYB: 360, GLYB: 182, ASPB: 186, SERB: 183, PROB: 357
2	-8.43	GLY B: 350	LYS B: 394, PHE B: 348, PRO B: 349, TRP B: 354, ARG B: 355, PHE B: 351, PRO B: 357, ARG B: 178, THR B: 181, THR B: 179, ARG B: 180, CYS B: 287, HIS B: 237
3	-9.35	GLY B: 350, LYS B: 394	GLY B: 395, ILE B: 396, TYR B: 397, PHE B: 348, LYS B: 398, PRO B: 349, GLY B: 288, CYS B: 287, TRP B: 354, PHE B: 351
4	-10.30	TYR B: 397	TRP B: 354, PRO B: 357, PHE B: 351, GLY B: 350, LYS B: 394, TRP B: 362, PHE B: 348, GLY B: 395, ILE B: 396, PRO B: 349, LYS B: 398
5	-8.19	-	LYS B: 394, GLY B: 395, ILE B: 396, TYR B: 397, PRO B: 349, PHE B: 348, TRP B: 354, LYS B: 398, GLY B: 350, PHE B: 351
6	-9.63	-	PHE B: 348, ARG B: 355, TRP B: 354, PHE B: 351, PRO B: 357, ARG B: 178, THR B: 179, THR B: 181, ARG B: 180, HIS B: 237, CYS B: 287, GLY B: 288, PRO B: 239, GLY B: 350
<b>CDK2</b>			
1	-11.86	-	GLY A: 11, GLN A: 131, GLU A: 12, ASN A: 132, LYS A: 33, ASP A: 145, ALA A: 144, VAL A: 18, PHE A: 80, ALA A: 31, VAL A: 64, LEU A: 134, GLU A: 81, ILE A: 10, LEU A: 83, PHE A: 82, HIS A: 84, GLN A: 85, ASP A: 86
2	-12.18	GLN A: 131	LYS A: 129, ASN A: 132, GLY A: 13, GLU A: 12, GLY A: 11, VAL A: 18, LYS A: 33, ALA A: 144, ASP A: 145, PHE A: 80, ALA A: 31, VAL A: 64, PHE A: 82, GLU A: 81, ILE A: 10, LEU A: 83, GLN A: 85, LEU A: 134, ASP A: 86
3	-12.56	-	VAL A: 64, PHE A: 80, ALA A: 144, LYS A: 33, ASP A: 145, LEU A: 83, ALA A: 31, PHE A: 82, LEU A: 134, ILE A: 10, GLY A: 11, GLN A: 85, ASP A: 86, ASN A: 132, LYS A: 129, GLN A: 131, GLY A: 13, GLU A: 12, GLU A: 81, VAL A: 18
4	-13.49	-	LYS A: 20, VAL A: 18, GLY A: 11, GLN A: 131, GLU A: 12, GLY A: 13, ASP A: 145, ASN A: 132, LYS A: 33, ALA A: 144, VAL A: 64, PHE A: 80, ALA A: 31, LEU A: 134, LEU A: 83, ILE A: 10, PHE A: 82, LYS A: 89, GLN A: 85, ASP A: 86, LEU A: 298, HIS A: 84
5	-11.49	ASP A: 145, LYS A: 33	HIS A: 84, ASP A: 86, ILE A: 10, GLY A: 11, VAL A: 18, GLU A: 12, GLY A: 13, GLY A: 16, THR A: 14, ASN A: 132, ALA A: 144, VAL A: 64, GLN A: 131, LEU A: 134, ALA A: 31, GLN A: 85, LEU A: 83, PHE A: 82
6	-11.57	-	VAL A: 18, ILE A: 10, LEU A: 83, PHE A: 80, ALA A: 31, VAL A: 64, GLU A: 81, LEU A: 134, PHE A: 82, HIS A: 84, GLN A: 85, LYS A: 89, LYS A: 88, GLN A: 131, GLY A: 11, GLY A: 13, GLU A: 12
<b>CDK6</b>			
1	-11.36	VAL A: 150	LEU A: 32, PRO A: 35, LEU A: 34, ARG A: 30, ARG A: 82, ALA A: 149, ALA A: 152, LEU A: 151, SER A: 78, ILE A: 198, ALA A: 191, LEU A: 193, PRO A: 195, LEU A: 192, SER A: 194
2	-13.27	ALAA: 152, VALA: 150	ASP A: 81, ARG A: 52, SER A: 78, VAL A: 77, LEU A: 151, PRO A: 74, LEU A: 185, ALA A: 149, PRO A: 195, ILE A: 198, GLU A: 31, LEU A: 34, ALA A: 191, LYS A: 36, THR A: 38, LEU A: 192, LEU A: 440
3	-13.83	ALAA: 152, VALA: 150	SER A: 39, LEU A: 40, THR A: 38, LEU A: 192, LEU A: 193, PRO A: 74, VAL A: 77, LEU A: 151, LEU A: 185, SER A: 78, ILE A: 198, ALA A: 149, PRA A: 195, LEU A: 34, SER A: 194, GLE A: 31, LYS A: 36

4	-14.28	ASP A: 81	GLU A: 148, HISB: 67, ALA A: 149, ARG A: 82, LEU A: 151, PRO A: 74, ALA A: 152, PRO A: 195, SER A: 78, LEU A: 193, ILE A: 198, LEU A: 185, ALA A: 191, LEU A: 40, VAL A: 77, ARG A: 52, LYS A: 36, VAL A: 150, GLU A: 31, LEU A: 34, ARG A: 30, LEU A: 33
5	-12.14	LEU A: 193	TRP A: 41, LEU A: 40, ASP A: 81, ARG A: 82, LEU A: 34, SER A: 78, ILE A: 198, VAL A: 77, LEU A: 185, PRO A: 74, ALA A: 152, PRO A: 195, LEU A: 151, VAL A: 150, SER A: 194, GLU A: 31, LEU A: 192, ALA A: 191, THR A: 38, LYS A: 36, PRO A: 35, CYS A: 85
6	-15.45	-	LEU A: 32, PRO A: 35, GLU A: 31, VAL A: 150, ARG A: 30, LEU A: 34, ALA A: 149, ARG A: 82, ASP A: 81, SER A: 78, ILE A: 198, ALA A: 152, LEU A: 151, PRO A: 74, LEU A: 185, VAL A: 77, ARG A: 52, ALA A: 191, LEU A: 40, LEU A: 192, SER A: 194, PRO A: 195, LYS A: 36
<b>EGFR</b>			
1	-10.04	CYS A: 751	ARG A: 817, CYS A: 773, GLY A: 772, LEU A: 694, MET A: 769, VAL A: 702, GLN A: 767, LEU A: 820, ALA A: 719, THR A: 830, MET A: 742, GLU A: 738, LYS A: 721, ASP A: 831
2	-11.14	THR A: 766	PHE A: 699, THR A: 830, LYS A: 721, MET A: 742, GLU A: 738, ASP A: 831, VAL A: 702, GLN A: 767, LEU A: 820, ALA A: 719, LEU A: 768, MET A: 769, LEU A: 694, GLY A: 772, CYS A: 773, ASN A: 818, ARG A: 817
3	-10.38	MET A: 769	GLY A: 695, PHE A: 699, VAL A: 702, LEU A: 694, GLY A: 772, ALA A: 719, LYS A: 721, LEU A: 768, THR A: 766, LEU A: 820, MET A: 742, THR A: 830 ARG A: 817, ASP A: 831
4	-11.65	-	ARG A: 817, PRO A: 853, ASP A: 813, LEU A: 834, GLU A: 734, LYS A: 851, GLY A: 833, ASP A: 737, VAL A: 741, LYS A: 836, ALA A: 835, ILE A: 735, GLU A: 738, PHE A: 832, LEU A: 723, ASP A: 831, PHE A: 699, ALA A: 698
5	-9.94	MET A: 769	GLY A: 695, VAL A: 702, ASP A: 831, THR A: 830, LEU A: 694, GLU A: 738, PHE A: 832, MET A: 742, LYS A: 721, THR A: 766, ALA A: 719, GLN A: 767, LEU A: 820, MEU A: 768, PRO A: 770, GLY A: 772, CYS A: 773, PHE A: 771
6	-10.54		ASP A: 831, PHE A: 699, GLY A: 695, VAL A: 702, THR A: 830, GLU A: 738, THR A: 766, MET A: 742, ALA A: 719, LEU A: 694, GLY A: 772, LEU A: 820, ASN A: 818
<b>VEGFR</b>			
1	-10.25	ARG A: 1049, ASN A: 921, LEU A: 838, CYS A: 917	GLY A: 839, VAL A: 846, ALA A: 864, GLU A: 915, PHE A: 916, LYS A: 918, PHE A: 919, GLY A: 920, LEU A: 1033, PHE A: 1045
2	-11.50	GLU A: 883, ASP A: 1044	LYS A: 866, ILE A: 886, LEU A: 887, ILE A: 890, VAL A: 896, VAL A: 897, LEU A: 1017, CYS A: 1022, ILE A: 1023, HIS A: 1024, ARG A: 1025, ILE A: 1042, CYS A: 1043, PHE A: 1045, GLY A: 1046
3	-11.77	GLU A: 883, ASP A: 1044	HIS A: 814, LYS A: 866, ILE A: 886, LEU A: 887, HIS A: 889, ILE A: 890, VAL A: 896, VAL A: 897, LEU A: 1017, LYS A: 1021, CYS A: 1022, ILE A: 1023, HIS A: 1024, ARG A: 1025, ILE A: 1042, CYS A: 1043, PHE A: 1045, GLY A: 1046
4	-12.39	ILE A: 1023	ILE A: 886, VAL A: 897, LEU A: 887, GLU A: 883, VAL A: 914, CYS A: 1043, LEU A: 1033, PHE A: 1045, ILE A: 890, ASP A: 1044, LEU A: 1017, VAL A: 896, ILE A: 1042, HIS A: 1024, CYS A: 1022, ARG A: 1025
5	-9.95	GLU A: 883	PHE A: 843, LYS A: 866, ALA A: 879, LEU A: 880, SER A: 882, ILE A: 886, LEU A: 887, ILE A: 890, VAL A: 896, VAL A: 897, LEU A: 1017, CYS

			A: 1022, ILE A: 1023, HIS A: 1024, ARG A: 1025, ILE A: 1042, CYS A: 1043, ASP A: 1044
6	-11.03	ASP A: 1050, ALA A: 842, PHE A: 843, ASP A: 1026, ARG A: 1030, ASP A: 1044, PHE ARG A: 1049, A: 1045, ALA A: 1048, ILE A: 1051, ALA A: 1063, ARG A: 1064, PRO A: LEU A: 1047, 1066 GLY A: 1046, ASN A: 1031	
<b>P53</b>			
1	-9.86	GLN A: 23	ARG A: 10, PHE A: 16, ASN A: 17, LYS A: 20, ILE A: 21, ILE A: 22, GLY A: 24, GLU A: 89, TYR A: 92, LEU A: 100, LEU A: 103, ARG A: 104, CYS A: 114, PRO A: 115
2	-11.32	-	ARG A: 10, HIS A: 11, PHE A: 16, ASN A: 17, LYS A: 20, ILE A: 21, ILE A: 22, GLN A: 23, GLY A: 24, ARG A: 61, GLU A: 89, TYR A: 92, LEU A: 100, LEU A: 103, ARG A: 104, CYS A: 114, PRO A: 115, HIS A: 198, GLY A: 199, ALA A: 200, ARG A: 203, VAL A: 229
3	-11.06	ARG A: 203, ASN A: 17	ARG A: 10, PHE A: 16, LYS A: 20, ILE A: 21, ILE A: 22, GLN A: 23, GLU A: 89, TYR A: 92, LEU A: 100, GLY A: 199, ALA A: 200, VAL A: 229, THR A: 230, PRO A: 231, ASN A: 232, GLN A: 260
4	-11.40	LEU A:100, THR A: 230	GLU A: 89, TYR A: 92, ARG A: 104, VAL A: 229, ARG A: 203, GLY A: 199, PRO A: 231, ASN A: 232, LYS A: 20, ARG A: 10, ASN A: 17, ILE A: 21, PHE A: 16, ILE A: 22, ARG A: 61, GLN A: 23
5	-9.95	ARG A:203, ILE A:21, ASN A:17	ARG A: 10, PHE A: 16, LYS A: 20, ILE A: 22, GLN A: 23, GLU A: 89, TYR A: 92, LEU A: 100, GLY A: 199, ALA A: 200, VAL A: 229, THR A: 230, PRO A: 231, ASN A: 232
6	-10.33	ARG A: 10	PHE A: 16, ASN A: 17, LYS A: 18, LYS A: 20, ILE A: 21, ILE A: 22, GLN A: 23, GLU A: 89, TYR A: 92, LEU A: 100, ARG A: 203, SER A: 228, VAL A: 229, THR A: 230, PRO A: 231, ASN A: 232
<b>PARP-1</b>			
1	-11.15	GLY A: 863	GLY A: 888, TYR A: 889, HIS A: 862, SER A: 904, ALA A: 898, LYS A: 903, PHE A: 897, TYR A: 896, GLU A: 988, MET A: 980
2	-11.15	ARG A: 878, ALA A: 880	PRO A: 881, ILE A: 879, TYR A: 896, GLY A: 894, ILE A: 895, TYR A: 889, HIS A: 862, GLY A: 876, SER A: 864, LEU A: 877, ILE A: 872, GLN A: 875, GLY A: 871, ASN A: 868
3	-11.08	ASN: 868, ARG: 878	SERA: 864, TYR A: 907, GLY A: 863, HIS A: 862, TYR A: 896, TYR A: 889, GLY A: 894, ALA A: 880, LEU A: 877, ILE A: 895, GLY A: 876, ILE A: 872, ARG A: 865, HIS A: 909
4	-11.66	ARG A: 878	PRO A: 881, ILE: A:879, TYR A: 889, ALA A: 880, GLY A: 894, TYR A: 896, GLN A: 875, HIS A: 862, LEU A: 877, GLY A: 871, GLY A: 876, ILE A: 895, ILE A: 872, ASN A: 868
5	-10.80	ASN A: 868, ALA A: 880, ARG A: 878	HIS A: 909, ARG A: 865, SER A: 864, TYR A: 907, GLY A: 863, HIS A: 862, TYR A: 896, ILE A: 879, TYR A: 889, GLY A: 894, LEU A: 877, ILE A: 895, GLY A: 876, ILE A: 872
6	-12.60	-	LEU A: 877, ILE A: 872, SER A: 864, HIS A: 862, ASN A: 868, GLY A: 863, GLU A: 988, ALA A: 898, SER A: 904, PHE A: 897, LYS A: 903, TYR A: 907, TYR A: 896, GLY A: 888, TYR A: 889, GLY A: 876, ARG A: 878, ILE A: 895