

Article

# Identification of Potential Allosteric Site Binders of Indoleamine 2,3-Dioxygenase 1 from Plants: A Virtual and Molecular Dynamics Investigation

Vitor Martins de Almeida <sup>1</sup>, Osvaldo Andrade Santos-Filho <sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup> Laboratório de Modelagem Molecular e Biologia Estrutural Computacional, Instituto de Pesquisas de Produtos Naturais Walter Mors, Centro de Ciências da Saúde, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Av. Carlos Chagas Filho, 373, Bloco H, 21941-599, Cidade Universitária, Rio de Janeiro, RJ, Brazil

\* Correspondence: osvaldo@ippn.ufrj.br

Received: date; Accepted: date; Published: date

## Supplementary Material

**Table S1.** Screened compounds using Mcule and ZINC 15 databases. The reference compound (Kushenol E) is marked in bold black. The 19 screened compounds used in the second-round docking simulations are shown in red.

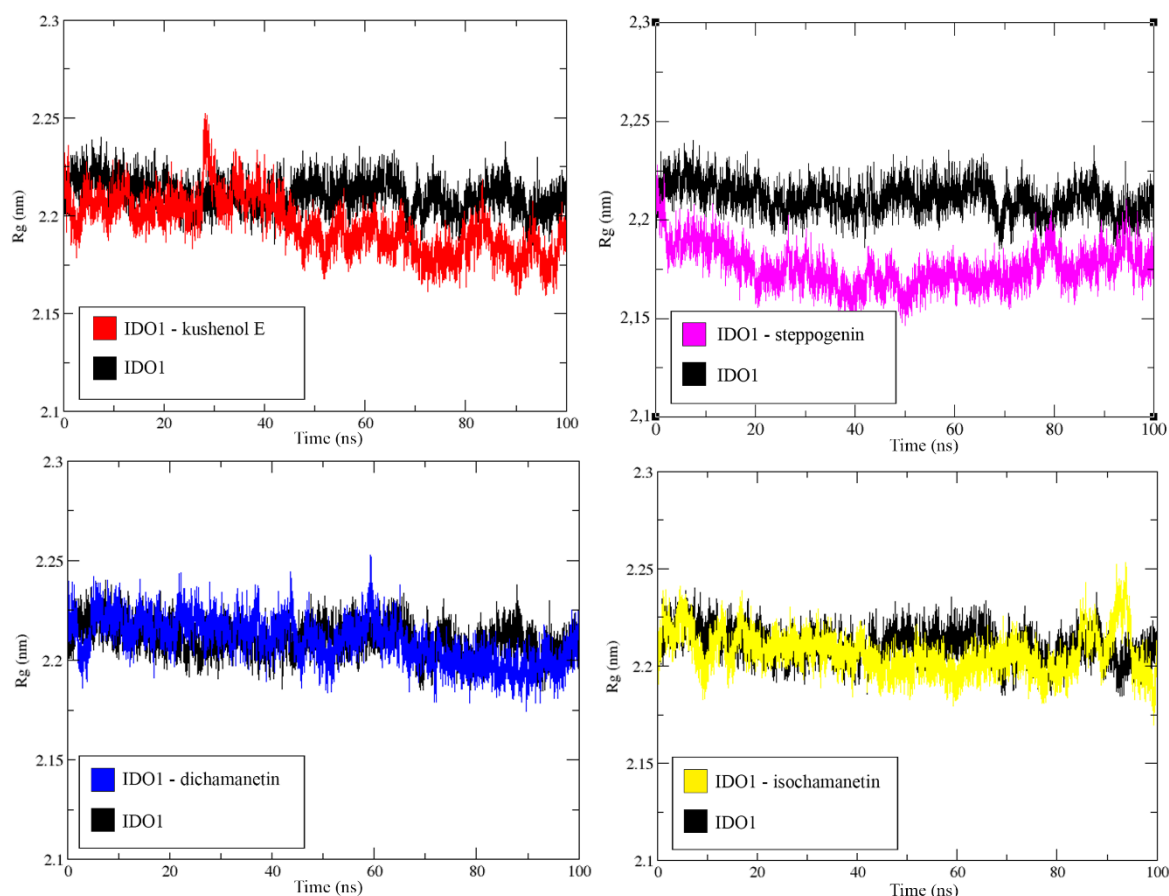
Compound (ID code)	Docking (kcal/mol)	Compound (ID code)	Docking (kcal/mol)
MCULE-5576692992-0	-8,1	ZINC000014727588	-6,7
MCULE-9555611424-0	-8	<b>Kushenol E</b>	<b>-6,6</b>
MCULE-2245505834-0	-7,8	MCULE-7258052902-0	-6,6
MCULE-1714548327-0	-7,7	MCULE-6668187578-0	-6,6
MCULE-8275106243-0	-7,6	MCULE-5457759324-0	-6,6
MCULE-6303182626-0	-7,6	MCULE-2108662486-0	-6,6
MCULE-8135607815-0	-7,6	ZINC000059587549	-6,6
MCULE-9361233668-0	-7,6	ZINC000013485407	-6,6
MCULE-2627819626-0	-7,5	MCULE-6745304759-0	-6,5
MCULE-5577419993-0	-7,5	MCULE-8662675920-0	-6,5
MCULE-3109336878-0	-7,4	MCULE-7337415562-0	-6,5
MCULE-4057380396-0	-7,4	MCULE-8223070696-0	-6,5
MCULE-1477744891-0	-7,4	ZINC000003873159	-6,5
MCULE-7842380240-0	-7,3	ZINC000014780759	-6,5
MCULE-3613127722-0	-7,2	ZINC000014727587	-6,5
MCULE-2530592174-0	-7,2	ZINC000003871182	-6,5
MCULE-6290700428-0	-7,1	MCULE-7064559962-0	-6,4

MCULE-9612591345-0	-7,1
MCULE-3904196669-0	-7,1
MCULE-6814312961-0	-7
ZINC000013339838	-7
ZINC000034165799	-7
MCULE-7513860584-0	-6,9
MCULE-3558918209-0	-6,9
MCULE-6717818413-0	-6,9
MCULE-5790553332-0	-6,9
MCULE-6122035709-0	-6,9
MCULE-6772374144-0	-6,9
MCULE-8640003899-0	-6,9
MCULE-6920051494-0	-6,9
MCULE-6883102548-0	-6,9
MCULE-8604836333-0	-6,8
MCULE-5717525103-0	-6,8
MCULE-6672284700-0	-6,8
MCULE-1514405777-0	-6,8
MCULE-4827438323-0	-6,7
MCULE-1097395119-0	-6,7
MCULE-1088177999-0	-6,7
MCULE-1651216901-0	-6,7
MCULE-4867351823-0	-6,7
MCULE-8960596008-0	-6,7
MCULE-4396859889-0	-6,7
ZINC000014727515	-6,7
ZINC000014727518	-6,7
ZINC000033832203	-6,7
MCULE-6674323180-0	-6,2
MCULE-7736830441-0	-6,2
MCULE-8939875451-0	-6,2
MCULE-2660644517-0	-6,2
MCULE-2776613173-0	-6,2
MCULE-5895803515-0	-6,2
MCULE-3925941144-0	-6,2
MCULE-5180733045-0	-6,2
MCULE-8876698541-0	-6,2
MCULE-8465457323-0	-6,2
MCULE-1040954793-0	-6,2
MCULE-3016034856-0	-6,2

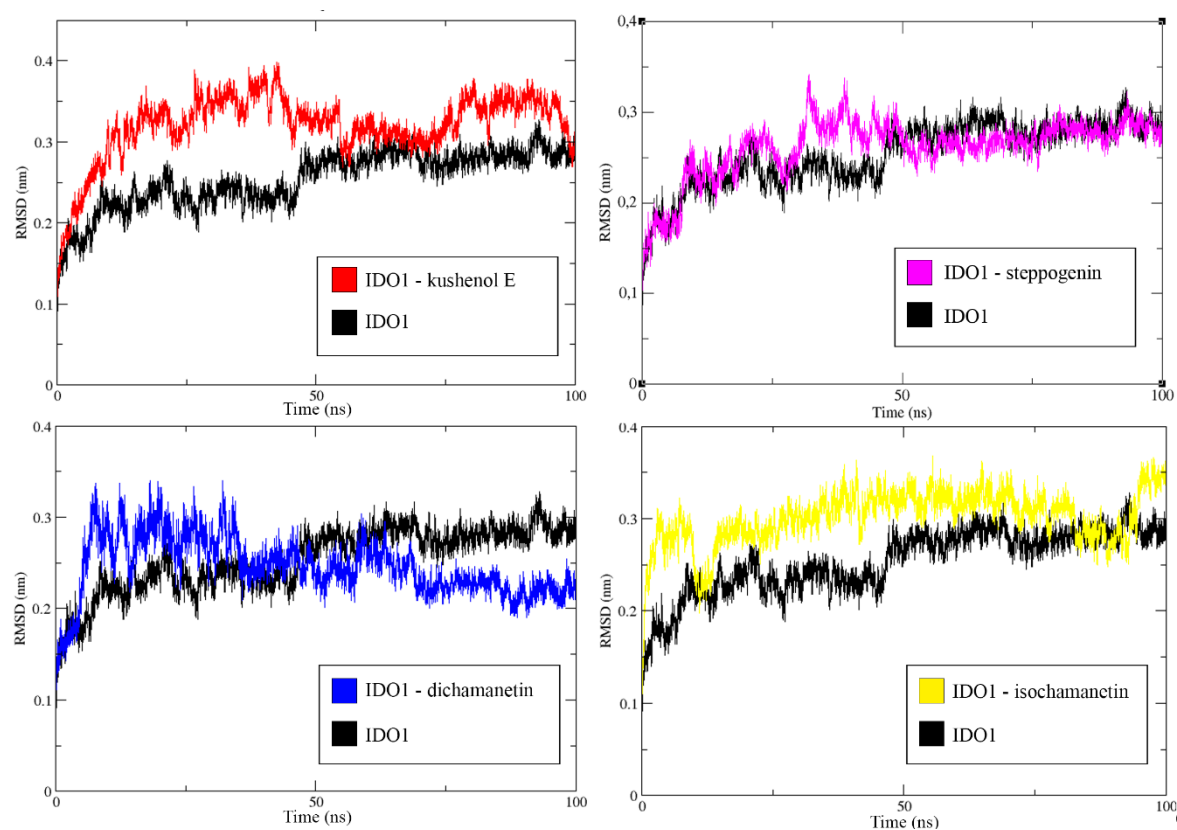
MCULE-7607710461-0	-6,4
MCULE-2373585148-0	-6,4
MCULE-4528750254-0	-6,4
MCULE-4861196207-0	-6,4
MCULE-3082150001-0	-6,4
MCULE-2990146105-0	-6,4
MCULE-2154315081-0	-6,4
ZINC000005158921	-6,4
ZINC000014641685	-6,4
MCULE-1335758047-0	-6,3
MCULE-8645775041-0	-6,3
MCULE-3559522784-0	-6,3
MCULE-8531878073-0	-6,3
MCULE-7707382821-0	-6,3
MCULE-1736405258-0	-6,3
ZINC000013485409	-6,3
ZINC000005854394	-6,3
MCULE-6580599773-0	-6,2
MCULE-4547911471-0	-6,2
MCULE-4427780251-0	-6,2
MCULE-1272280425-0	-6,2
MCULE-2862082028-0	-6,2
MCULE-7196504979-0	-6,2
MCULE-9501093013-0	-6,2
MCULE-5533647840-0	-6,2
MCULE-2337043419-0	-6,2
MCULE-7830277688-0	-6,2
MCULE-1466545273-0	-6,2
MCULE-7830277688-0	-6,2
MCULE-7439794905-0	-6,1
MCULE-8195585327-0	-6
MCULE-1893775486-0	-6
MCULE-6964743359-0	-6
MCULE-9439004515-0	-6
MCULE-7578970975-0	-6
MCULE-8498690406-0	-6
MCULE-5306878717-0	-6
MCULE-2064774552-0	-6
MCULE-5637234780-0	-6
MCULE-7275500281-0	-6

MCULE-6590579030-0	-6,2
MCULE-1122459209-0	-6,2
MCULE-8240919679-0	-6,2
MCULE-2424476488-0	-6,2
MCULE-6451111457-0	-6,2
MCULE-5001672302-0	-6,1
MCULE-9917900371-0	-6,1
MCULE-9197350217-0	-6,1
MCULE-7104867839-0	-6,1
MCULE-5704405221-0	-6,1
MCULE-7416386512-0	-6,1
MCULE-2598470840-0	-6,1
MCULE-6753110271-0	-6,1
MCULE-3240859900-0	-6,1
MCULE-1297538743-0	-6,1
MCULE-5852778653-0	-6,1
MCULE-3254872691-0	-6,1
MCULE-3976263760-0	-6,1
MCULE-5052743999-0	-6,1
MCULE-9302131889-0	-6,1
MCULE-9370973230-0	-6,1
MCULE-6631561492-0	-6,1
MCULE-8726416131-0	-6,1
MCULE-8084114235-0	-6,1
MCULE-3924606015-0	-6,1
MCULE-4114823523-0	-6,1
MCULE-6331583005-0	-6,1
MCULE-1517499241-0	-6,1
MCULE-4015613387-0	-6,1
MCULE-3938369351-0	-6,1
MCULE-3625538935-0	-6,1

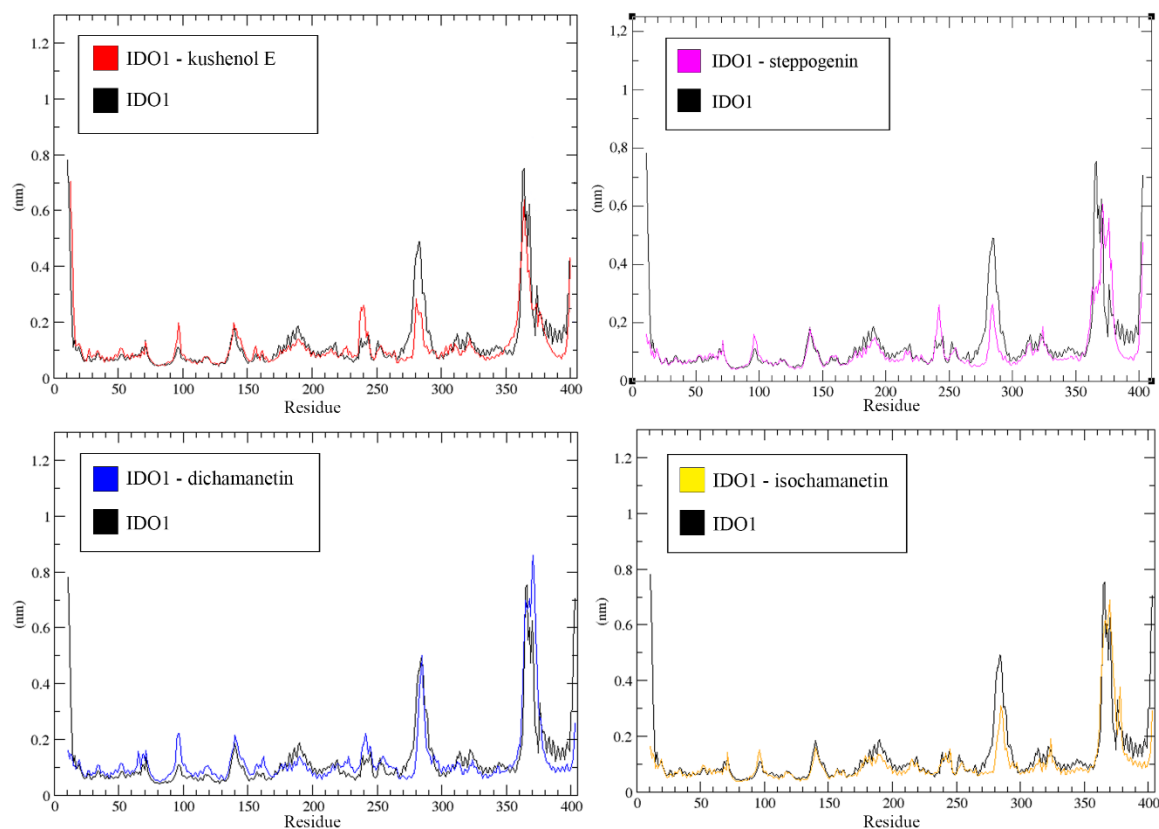
MCULE-9332914030-0	-6
MCULE-7826903505-0	-6
MCULE-6305563775-0	-6
MCULE-8743190189-0	-6
MCULE-1243164622-0	-6
MCULE-4107309014-0	-5,9
MCULE-5489217450-0	-5,9
MCULE-2527326110-0	-5,9
MCULE-4005429744-0	-5,9
MCULE-8068976578-0	-5,9
MCULE-1231893585-0	-5,9
MCULE-2855478624-0	-5,9
MCULE-5357027007-0	-5,9
MCULE-5732404629-0	-5,9
MCULE-6016729456-0	-5,9
MCULE-7442958115-0	-5,8
MCULE-7259979801-0	-5,8
MCULE-9865914914-0	-5,8
MCULE-6698275589-0	-5,8
MCULE-2067187231-0	-5,8
MCULE-2864630695-0	-5,7
MCULE-1075981976-0	-5,7
MCULE-9497505068-0	-5,7
MCULE-8143016945-0	-5,7
MCULE-2924473141-0	-5,6
MCULE-9138980318-0	-5,6
MCULE-6894860287-0	-5,5
MCULE-1219453843-0	-5,5
MCULE-4510679729-0	-5,4
MCULE-1746821853-0	-5,3



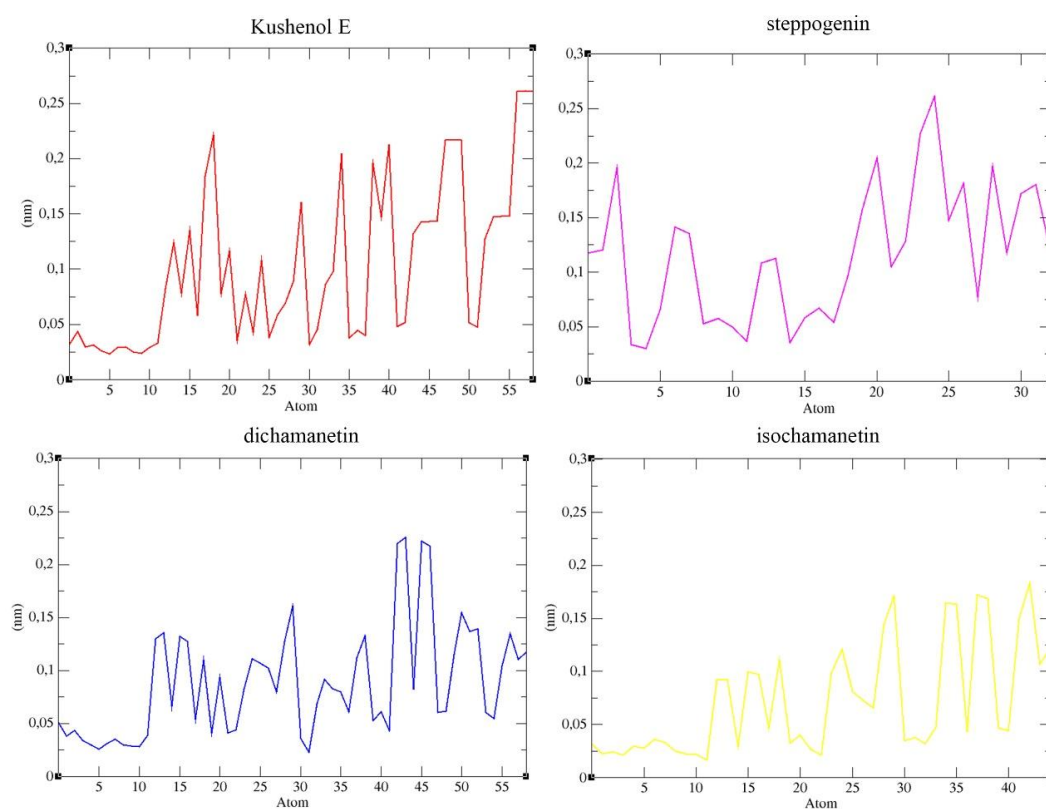
**Figure S1.** Radius of gyration plots of apo IDO1 (black), IDO1-Kushenol E (red), IDO1-steppogenin (magenta), IDO1-dichamanetin (blue), and IDO1-isochamanetin (yellow) systems.



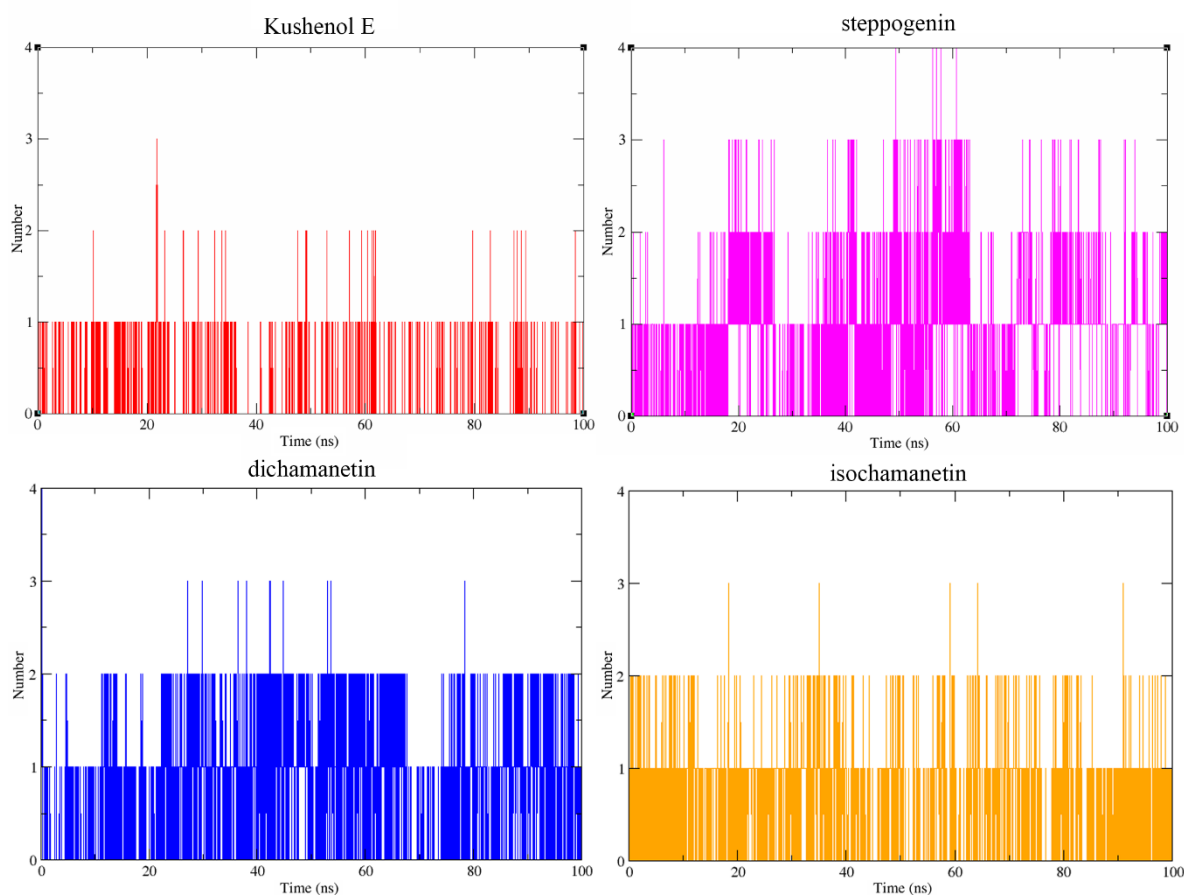
**Figure S2.** RMSD plots. Apo IDO1 (black), IDO1- Kushenol E (red), IDO1-steppogenin (magenta), IDO1-dichamanetin (blue), and IDO1-isochamanetin (yellow).



**Figure S3.** RMSF plots. Apo IDO1 (black), IDO1- Kushenol E (red), IDO1-steppogenin (magenta), IDO1-dichamanetin (blue), and IDO1-isochamanetin (yellow).



**Figure S4.** RMSF plots for the flavonoids: Kushenol E (red), steppogenin (magenta), dichamanetin (blue), and isochamanetin (yellow).



**Figure S5.** Hydrogen bond frequency. IDO1 Kushenol E (red), IDO1-steppogenin (magenta), IDO1-dichamanetin (blue) and IDO1-isochamanetin (yellow).

**Publisher's Note:** MDPI stays neutral with regard to jurisdictional claims in published maps and institutional affiliations.



© 2020 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY) license (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).