

**A combination of *in-silico* and SAR studies
to identify binding hot spots of Bcl-xL inhibitors**

Nicolas Levoïn^{1*}, Duc Duy Vo², Fabien Gautier^{3,4,5}, Sophie Barillé-Nion³, Philippe Juin^{3,4},
Olivier Tasseau² and René Grée²

¹ *Bioprojet-Biotech, 4 rue du Chesnay Beauregard, BP 96205, 35762 Saint Grégoire, France.*

² *Université de Rennes 1, Institut des Sciences Chimiques de Rennes, CNRS UMR 6226, 263, Avenue du Général Leclerc, 35042 Rennes Cedex, France.*

³ *UMR 892 INSERM /6299 CNRS / Université de Nantes, Team 8 "Cell survival and tumor escape in breast cancer", Institut de Recherche Thérapeutique de l'Université de Nantes, 8 quai Moncouso, BP 70721, 44007 Nantes Cedex 1, France.*

⁴ *Institut de Cancérologie de l'Ouest, Centre de Lutte contre le Cancer René Gauducheau, Boulevard Jacques Monod, 44805 Saint Herblain-Nantes Cedex, France.*

⁵ *Plateforme IMPACT[®], Biogenouest Institut de Recherche Thérapeutique de l'Université de Nantes, 8, quai Moncouso, BP 70721 44007 Nantes Cedex 1, France.*

Supplementary material

¹H and ¹³C NMR spectra of compound 5	page 2
¹H and ¹³C NMR spectra of compound 6	page 3
¹H and ¹³C NMR spectra of compound 1	page 4
¹H and ¹³C NMR spectra of compound 8	page 5
¹H and ¹³C NMR spectra of compound 9	page 6
¹H and ¹³C NMR spectra of compound 10	page 7
¹H and ¹³C NMR spectra of compound 11	page 8
¹H and ¹³C NMR spectra of compound 12	page 9
¹H and ¹³C NMR spectra of compound 2	page 10















