

# Supplementary Materials: The Development of CK2 Inhibitors: From Traditional Pharmacology to in Silico Rational Drug Design

Giorgio Cozza

**Table S1.** Summary of all CK2 crystal structures deposited in the Protein Data Bank (PDB).

PDB ID	Organism	Ligand	Resolution (Å)	Year
1DAW	<i>Zea mays</i>	ANP	2.20	2000
1DAY	<i>Zea mays</i>	GNP	2.20	2000
1DS5	<i>Zea mays</i>	AMP	3.16	2001
1F0Q	<i>Zea mays</i>	Emodin	2.63	2001
1J91	<i>Zea mays</i>	TBB	2.22	2002
1JAM	<i>Zea mays</i>	-----	2.18	2002
1JWH	<i>Homo sapiens</i>	ANP	3.10	2002
1LP4	<i>Zea mays</i>	ANP	1.86	2002
1LR4	<i>Zea mays</i>	BEN	2.00	2002
1LPU	<i>Zea mays</i>	BEN	1.86	2002
1M2P	<i>Zea mays</i>	HNA	2.00	2003
1M2R	<i>Zea mays</i>	MNY	1.70	2003
1M2Q	<i>Zea mays</i>	MXN	1.79	2003
1NA7	<i>Homo sapiens</i>	-----	2.40	2003
1PJK	<i>Homo sapiens</i>	ANP	2.50	2003
1OM1	<i>Zea mays</i>	IQA	1.68	2004
1ZOH	<i>Zea mays</i>	K44	1.81	2005
1ZOG	<i>Zea mays</i>	K37	2.30	2005
1ZOE	<i>Zea mays</i>	K25	1.77	2005
2OXX	<i>Zea mays</i>	K22	2.30	2007
2OXD	<i>Zea mays</i>	K32	2.30	2007
2OXY	<i>Zea mays</i>	K17	1.81	2007
2PVR	<i>Homo sapiens</i>	ANP	1.61	2007
2PVJ	<i>Zea mays</i>	P44	1.70	2008
2PVM	<i>Zea mays</i>	P29	2.00	2008
2PVH	<i>Zea mays</i>	P19	2.20	2008
2PVK	<i>Zea mays</i>	P45	1.90	2008
2PVL	<i>Zea mays</i>	P55	1.90	2008
2PVN	<i>Zea mays</i>	P63	2.00	2008
2QC6	<i>Zea mays</i>	DBC	1.85	2008
2R7I	<i>R. norvegicus</i>	-----	3.00	2008
3BE9	<i>Zea mays</i>	P04	2.00	2008
3C13	<i>Homo sapiens</i>	Emodin	1.95	2008
3BQC	<i>Homo sapiens</i>	Emodin	1.50	2008
3FL5	<i>Zea mays</i>	Quinalizari n	2.30	2009
3FWQ	<i>Homo Sapiens</i>	glycerol	3.20	2009
3H30	<i>Homo sapiens</i>	DRB	1.56	2009
3E2B	<i>Homo sapiens</i> ( $\alpha'$ )	CCK	3.20	2009
3JUH	<i>Homo sapiens</i>	ANP	1.66	2009

2ZJW	<i>Homo sapiens</i>	Ellagic acid	2.40	2009
3KXM	<i>Zea mays</i>	K74	1.75	2010
3KXN	<i>Zea mays</i>	K88	2.00	2010
3KXH	<i>Zea mays</i>	K66	1.70	2010
3KXG	<i>Zea mays</i>	K64	1.70	2010
3PVG	<i>Zea mays</i>	K68	1.50	2010
3NGA	<i>Homo sapiens</i>	CX-4945	2.71	2010
3NSZ	<i>Homo sapiens</i>	ANP	1.30	2010
3OWJ	<i>Homo sapiens</i>	1EL	1.85	2010
3OWK	<i>Homo sapiens</i>	18E	1.80	2010
3OWL	<i>Homo sapiens</i>	19E	2.10	2010
3MB6	<i>Homo sapiens</i>	01I	1.75	2010
3MB7	<i>Homo sapiens</i>	14I	1.65	2010
3PWD	<i>Zea mays</i>	NBC	2.20	2011
3PZH	<i>Zea mays</i>	Emodin	1.92	2011
3Q04	<i>Homo sapiens</i>	-----	1.80	2011
3AT2	<i>Homo sapiens</i>	-----	1.60	2011
3AMY	<i>Homo sapiens</i>	Apigenin	2.30	2011
3RP0	<i>Homo sapiens</i>	ANP	3.00	2011
3ROT	<i>Homo sapiens</i>	CX-5279	1.75	2011
1F0Q	<i>Zea mays</i>	Emodin	2.63	2001
1J91	<i>Zea mays</i>	TBB	2.22	2002
1JAM	<i>Zea mays</i>	-----	2.18	2002
1JWH	<i>Homo sapiens</i>	ANP	3.10	2002
1LP4	<i>Zea mays</i>	ANP	1.86	2002
1LR4	<i>Zea mays</i>	BEN	2.00	2002
1LPU	<i>Zea mays</i>	BEN	1.86	2002
1M2P	<i>Zea mays</i>	HNA	2.00	2003
1M2R	<i>Zea mays</i>	MNY	1.70	2003
1M2Q	<i>Zea mays</i>	MXN	1.79	2003
1NA7	<i>Homo sapiens</i>	-----	2.40	2003
1PJK	<i>Homo sapiens</i>	ANP	2.50	2003
1OM1	<i>Zea mays</i>	IQA	1.68	2004
1ZOH	<i>Zea mays</i>	K44	1.81	2005
1ZOG	<i>Zea mays</i>	K37	2.30	2005
1ZOE	<i>Zea mays</i>	K25	1.77	2005
2OXX	<i>Zea mays</i>	K22	2.30	2007
2OXD	<i>Zea mays</i>	K32	2.30	2007
2OXY	<i>Zea mays</i>	K17	1.81	2007
2PVR	<i>Homo sapiens</i>	ANP	1.61	2007
2PVJ	<i>Zea mays</i>	P44	1.70	2008
2PVM	<i>Zea mays</i>	P29	2.00	2008
2PVH	<i>Zea mays</i>	P19	2.20	2008
2PVK	<i>Zea mays</i>	P45	1.90	2008
2PVL	<i>Zea mays</i>	P55	1.90	2008
2PVN	<i>Zea mays</i>	P63	2.00	2008
2QC6	<i>Zea mays</i>	DBC	1.85	2008
2R7I	<i>R. norvegicus</i>	-----	3.00	2008
3BE9	<i>Zea mays</i>	P04	2.00	2008
3C13	<i>Homo sapiens</i>	Emodin	1.95	2008
3BQC	<i>Homo sapiens</i>	Emodin	1.50	2008
3FL5	<i>Zea mays</i>	Quinalizari n	2.30	2009

3FWQ	<i>Homo Sapiens</i>	glycerol	3.20	2009
3H30	<i>Homo sapiens</i>	DRB	1.56	2009
3E2B	<i>Homo sapiens</i> ( $\alpha'$ )	CCK	3.20	2009
3JUH	<i>Homo sapiens</i>	ANP	1.66	2009
2ZJW	<i>Homo sapiens</i>	Ellagic acid	2.40	2009
3KXM	<i>Zea mays</i>	K74	1.75	2010
3KXN	<i>Zea mays</i>	K88	2.00	2010
3KXH	<i>Zea mays</i>	K66	1.70	2010
3KXG	<i>Zea mays</i>	K64	1.70	2010
3PVG	<i>Zea mays</i>	K68	1.50	2010
3NGA	<i>Homo sapiens</i>	CX-4945	2.71	2010
3NSZ	<i>Homo sapiens</i>	ANP	1.30	2010
3OWJ	<i>Homo sapiens</i>	1EL	1.85	2010
3OWK	<i>Homo sapeiens</i>	18E	1.80	2010
3OWL	<i>Homo sapiens</i>	19E	2.10	2010
3MB6	<i>Homo sapiens</i>	01I	1.75	2010
3MB7	<i>Homo sapiens</i>	14I	1.65	2010
3PWD	<i>Zea mays</i>	NBC	2.20	2011
3PZH	<i>Zea mays</i>	Emodin	1.92	2011
3Q04	<i>Homo sapiens</i>	-----	1.80	2011
3AT2	<i>Homo sapiens</i>	-----	1.60	2011
3AMY	<i>Homo sapiens</i>	Apigenin	2.30	2011
3RP0	<i>Homo sapiens</i>	ANP	3.00	2011
3ROT	<i>Homo sapiens</i>	CX-5279	1.75	2011
3PE1	<i>Homo sapiens</i>	CX-4945	1.60	2011
3PE2	<i>Homo sapiens</i>	CX-5011	1.90	2011
3OFM	<i>Homo sapiens</i> ( $\alpha'$ )	4B0	2.00	2011
3AT3	<i>Homo sapiens</i>	ATK	2.60	2011
3AT4	<i>Homo sapiens</i>	CCK	2.20	2011
3RPS	<i>Homo sapiens</i>	4B0	2.30	2011
3Q9W	<i>Homo sapiens</i>	Emodin	1.70	2012
3Q9Y	<i>Homo sapiens</i>	Quinalizari n	1.80	2012
3Q9X	<i>Homo sapiens</i>	Emodin	2.20	2012
3Q9Z	<i>Homo sapiens</i>	Quinalizari n	2.20	2012
3AXW	<i>Homo sapiens</i>	TID	2.50	2012
3U9C	<i>Homo sapiens</i>	Resorufin	3.20	2012
4DGO	<i>Zea mays</i>	0JW	1.96	2012
4DGM	<i>Zea mays</i>	Apigenin	1.65	2012
4DGN	<i>Zea mays</i>	Luteolin	1.75	2012
4DGL	<i>Homo sapiens</i>	-----	-----	2012
4ANM	<i>Zea mays</i>	WUL	1.70	2012
3QA0	<i>Homo sapiens</i>	-----	2.50	2012
3U4U	<i>Homo sapiens</i>	LNH	2.20	2012
4FBX	<i>Homo sapiens</i>	0TJ	2.33	2012
3U87	<i>Homo sapiens</i>	ANP	2.90	2012
3W8L	<i>Homo sapiens</i>	I6P	2.40	2013
3WAR	<i>Homo sapiens</i>	-----	1.04	2013
4IB5	<i>Homo sapiens</i>	CL	2.20	2013
4FI1	<i>S. cerevisiae</i>	ATP	2.09	2013
4IB5	<i>Homo sapiens</i>	Pc (peptide)	2.20	2013
4GRB	<i>Homo sapiens</i>	0XG	2.15	2013

4GUB	<i>Homo sapiens</i>	0Y4	2.20	2013
4MWH	<i>S. cerevisiae</i>	ATP	2.09	2013
4MD7	<i>Homo sapiens</i>	----	3.10	2013
4MD8	<i>Homo sapiens</i>	----	3.30	2013
4MD9	<i>Homo sapiens</i>	----	3.50	2013
4NH1	<i>Homo sapiens</i>	----	3.30	2014
4JQE	<i>S. cerevisiae</i>	ANP	1.77	2014
4JR7	<i>S. cerevisiae</i>	GNP	1.48	2014
4LFI	<i>S. cerevisiae</i>	GNP	1.85	2014
4KWP	<i>Homo sapiens</i>	TDB	1.25	2014
4BXA	<i>Homo sapiens</i>	JRJ	2.65	2014
4BXB	<i>Homo sapiens</i>	JRJ	2.35	2014
3WIK	<i>Homo sapiens</i>	LCD	2.00	2014
3WIL	<i>Homo sapiens</i>	LCT	2.90	2014
4RLK	<i>Zea mays</i>	E91	1.24	2015
4RLL	<i>Zea mays</i>	E91	1.85	2015
3WOW	<i>Homo sapiens</i>	ANP	2.50	2015
4UB7	<i>Homo sapiens</i>	FLC26	2.21	2015
4UBA	<i>Homo sapiens</i>	FLC26	2.99	2015
5CQU	<i>Homo sapiens</i>	JRJ	2.35	2015
5CQW	<i>Homo sapiens</i>	JRJ	2.65	2015
3WIL	<i>Homo sapiens</i>	Comp. 3	2.90	2014
5B0X	<i>Homo sapiens</i>	HCK	2.30	2016
5H8B	<i>Homo sapiens</i>	5Y2	2.55	2016
5H8E	<i>Homo sapiens</i>	5Y3	2.15	2016
5H8G	<i>Homo sapiens</i>	5Y4	2.00	2016
5CLP	<i>Homo sapiens</i>	42J	1.68	2016
5CS6	<i>Homo sapiens</i>	K82	1.88	2016
5CSH	<i>Homo sapiens</i>	54E	1.59	2016
5CSP	<i>Homo sapiens</i>	54G	1.50	2016
5CSV	<i>Homo sapiens</i>	GAB	1.38	2016
5CU3	<i>Homo sapiens</i>	54S	1.79	2016
5CU4	<i>Homo sapiens</i>	54S	1.56	2016
5CU6	<i>Homo sapiens</i>	ATP	1.36	2016
5CVF	<i>Homo sapiens</i>	54Z	1.63	2016
5CVG	<i>Homo sapiens</i>	----	1.25	2016
5CVH	<i>Homo sapiens</i>	ADP	1.85	2016
5CT0	<i>Homo sapiens</i>	54P	2.01	2016
5CTP	<i>Homo sapiens</i>	54R	2.03	2016
5CU0	<i>Homo sapiens</i>	54G	2.18	2016
5CU2	<i>Homo sapiens</i>	54G, 551	1.71	2016
5CX9	<i>Homo sapiens</i>	551	1.73	2016

---