

Table 2 The ligand-receptor interaction residues

PDB ID	Catalytic site residues (CSA database)	Diosgenin	Diosmetin	Morin	Piperine	Sinapic acid	Syringic acid	Vanillic acid	Veratric acid
1O8A	Glu384, His353, His513, Ala354, Tyr 523	Asn85, Asn136, Val518, Phe512, Ser355, Asn70, Ser516, Arg124, Glu143, Tyr62, Leu81, Leu140, Leu82, Leu139	Lys454, Glu376, Thr282, Tyr520, His513, His353, Val379, Asp453, Gln281, Tyr523	Glu376, Thr282, Lys454, Asp415, His383, His353, His513, Tyr523, Asp453, Phe457, Val379, Phe527	Gly404, Ser222, Asn406, Pro407, His410, Met223, Phe570, Glu403, Glu225, Lys118, Lys117, Tyr213	Asn277, Thr282, Lys454, Asp415, Glu376, Gln281, His383, Asp453, Val379	Asn66, Leu81, Leu140, Asn70, Leu140, Tyr69, Leu139, Ser516, Pro515, Glu143, Asn70, Asn136	Trp220, Arg124, Ser219, Asn211, Ala208, Glu123, Ala207, Asp121, Trp220, Ile204, Ala208	Ser219, Arg124, Asn211, Ala208, Glu123, Ala207, Asp121, Trp220, Ile204, Tyr135
1PY5	Lys335, Lys337, Thr375, Asp333; (H)	Ser287, Lys337, Gly212, Asp290, Lys213, Ile211, Asp351, Leu340, Lys232, Ala230, Val219, Leu260, Ser280, Leu278	Leu278, Asp351, Lys337, Ser287, Tyr249, Ser280, Val279, Ala350, Val231, Lys232, Ala230, Leu340, Asp290, Ile211, Gly286, Val219, Leu260	Tyr249, Leu278, Asp351, Ile211, Val279, Lys232, Ala230, Ser280, Leu260, Ala230, Val231, Val219, Gly286, Leu340, Ala350	Ser287, Ser280, Leu278, Lys232, Leu260, Ala230, Val219, Asp351, Glu245, Leu340, Lys213, Asp290, Lys337	Leu278, Ala230, Ser280, Lys232, Val231, Val219, Val279, His283, Tyr282, Asp351, Leu340, Ile211	His283, Leu340, Tyr282, Ile211, Gly212, Ala230, Leu260, Asp281, Val219	His283, Ile211, Tyr282, Ser280, Leu260, Asp281, Leu340, Gly212, Val219	His283, Asp281, Ala230, Leu340, Tyr282, Asp351, Val219, Ile211, Lys232

--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--

2ESM	Lys200, Thr237, Asp198, Asp202; (H)	Gln185		Lys85, Gly65, Asn186, Val70				Val70	
		Asp35, Glu74, Arg70, Met71, Asp145, Lys72, Tyr39, Arg67	Gly88, Asp202, Gly85, Arg84, Asp216, Val90, Phe368, Ala103, Leu205, Ile82	Glu154, Val137, Tyr155, Leu205, Ala103, Ile82, Met153, Phe368, Gly83, Val90, Arg84, Asp216, Gly85	Met153, Val137, Ala103, Glu154, Leu205, Val90, Ile82, Phe368, Asp160, Gly83, Asp369, Leu371, Asp370	Asp35, Glu74, Arg67, Tyr39, Lys72, Asp145, Met71, Arg70	Gly88, Arg84, Gly85, Ala86, Lys105, Asp216, Phe87, Phe120, Thr219, Asp117, Val235, Ser118, Ser116	Ile82, Glu154, Met156, Phe368, Val90, Gly83, Asp216, Leu205, Met153, Ala103, Tyr155,	Asp202, Asp160, Met153, Tyr155, Val90, Met156, Ile82, Ala103, Phe368, Leu205, Asp216
2VOZ	Asp215, Ser 35, Asp32; (H)	Asp32, Thr12, Leu114, Tyr220, Ser219, Gln13, Pro111, Thr77, Phe117, Val120, Val30, Gly217, Tyr75	Pro111, Ser219, Asp32, Leu114, Ala115, Phe117, Gln13, Gly217, Thr77, Phe112, Asp215, Tyr75	Ser219, Asp32, Leu114, Gln13, Val30, Phe117, Val120, Tyr75, Gly217, Ala218	Gly217, Phe117, Ile291, Tyr75, Val120, Asp32, Asp215, Ser76, Val30, Thr295, Gly34	Tyr14, Thr216, Ala303, Val30, Ala218, Ser219, Gly217, Thr12, Gln13, Phe117	Ser219, Ala115, Pro111, Leu114, Gly217, Phe117, Gln13, Ala218, Thr12, Val30	Asp32, Asp215, Phe112, Thr77, Gly78, Val120, Tyr75, Gly217	Thr12, Ser219, Tyr75, Thr77, Ala218, Asp32, Val120, Val30, Gln13, Gly217, Phe117
		Ser541, Phe538, Lys401, Phe537, Asn442, Arg232, Trp558, Phe445, Val544	Ser716, Ser723, Arg145, Trp146, Arg718, Ser735, Pro734,	Arg738, Ser150, Ser716, Ser735, Asn566, Trp146, Arg145, Phe149	His732, Asp730, Ser735, Asn566, Trp714, Val604, Phe149, Ala567, Arg738,	Arg145, Ser150, Phe149, Arg738, Ser733, Ser735, Trp714, Pro734	Phe149, Ser150, Thr148, Ser735, Ser716, Trp146, Cys715, Gly147, Trp714	Thr148, Phe149, Ser716, Ser150, Ser735, Cys715, Val713, Gly147,	Ser150, Phe149, Thr148, Trp146, Arg718, Ser735, Arg145, Trp714
3DWB	Arg738, His732, Glu608, Asp671; (H)								

		Phe509, Gln557, Val519		His732	His607, Glu608, Arg718, Pro734	Arg718, Trp146, Gly147	Arg145, Val713, Arg718	Arg718, Trp146	Gly147,
				Leu932, Lys857, Tyr931, Ala880, Gly935, Leu855, Leu983, Met929, Asn981, Arg980, Gly858, Gly856	Arg980, Asp976, Gly858, Asn859, Asn981, Gly993, Leu983, Asp994, Leu855, Ala880, Val863, Leu932, Gly935	Asp994, Leu932, Gly993, Val863, Glu930, Leu855, Leu983, Ala880, Tyr931, Gly935	Leu932, Leu855, Val863, Leu983, Val911, Ala880, Met929, Tyr931, Gly935	Phe860, Gly861, Gly996, Asn859, Leu884, Lys882, His891, Phe895, Glu898, Asp894	Leu932, Asp994, Gly993, Val863, Met929, Leu855, Leu983, Tyr931, Ala880
3RVG	-	Tyr931, Gly993, Pro933, Ser936, Gly935, Leu855, Leu983, Gly856, Asp994	Gly993, Glu930, Leu932, Tyr931, Gly935, Leu855, Val863, Ala880, Leu983, Met929, Val911						
6COX	Tyr 385, Gln 203, His 207	Cys41, Tyr136, Asp157, Asn34, Ala156, Gly135, Pro154, Cys47, Pro153, Cys36, Gln461, Asn39, Gly45	Ala156, Glu465, Cys41, Val155, Gly135, Pro154, Pro153, Leu152, Asn39, Arg469	Asp125, Gln42, Asn43, Gly45, Glu465, Cys41, Ala151, Arg44, Arg469, Tyr130		Gln192, Ala516, His90, Val523, Ser353, Tyr355, Leu352, Ala527, Arg120, Phe518, Val349	Leu152, Asn39, Arg44, Ala151, Arg469, Cys41, Lys468, Glu465	Trp387, Thr206, His386, Tyr385, His207, His388, Gln203, Ala202, Ala199, Leu391, Leu390	Thr206, Tyr385, Ala202, Trp387, Gln203, His388, Leu390, Leu391, Ala199

Bold residues are involved in hydrogen bond contact between ligand and receptor. H denotes the catalytic site residues predicted from homology.