

Supporting Information

**New generation of Top I inhibitors from camptothecin family
spontaneously alkylating DNA**

Beata Naumczuk, Katarzyna Wiktorska, Katarzyna Lubelska, Robert Kawęcki, Wojciech Bocian, Elżbieta Bednarek, Jerzy Sitkowski, Zdzisław Chilmończyk and Lech Kozerski*

Table 1S. The Selectivity Indexes of compounds **2a-e**.

Cell lines	IC ₅₀ , ratio, normal vs. cancer cell						
	1b	1c	2a	2b	2c	2d	2e
MDA	64	14.6	366	1250	270	3365	2700
MCF7	7.5	6.4	81	166	87	447	103
Caco2	5.2	0.38	44	30.7	50	37	268
HT29	249	13.2	895	988	687	4900	9460
HL60	1245	21.3	6710	16900	1760	46800	23000
A549	178	3.38	1130	2860	981	3700	1890

Chemical shift changes of d(GCGATCGC)₂ on addition of **2**.

Octamer d(GCGATCGC)₂ was dissolved in 600 μL of H₂O/D₂O (9:1 v/v) containing K₃PO₄ (25 mM) and NaCl (25 mM). This solution was mixed with 2 eq. of camptothecins **2** at 10°C and pH was adjusted to 6.

Table 2S. Chemical shift changes for H1' protons of d(GCGATCGC)₂ (1 eq.) on addition of **2** (2 eq.) in aq. phosphate buffer at pH 6, 10°C.

	H1'				
	2a	2b	2c	2d	2e
G1	0,14	0,13	0,09	0,15	0,1
C2	0,04	0,05	0,04	0,05	0,05
G3	0,04	0,04	0,03	0,04	0,03
A4	0,03	0,02	0,02	0,03	0,02
T5	0,03	0,03	0,02	0,03	0,02
C6	0,04	0,04	0,03	0,04	0,03
G7	0,03	0,03	0,03	0,04	0,03
C8	0,08	0,07	0,07	0,09	0,07

Table 3S. Chemical shift changes for H6 or H8 protons of d(GCGATCGC)₂ (1 eq.) on addition of **2** (2 eq.) in aq. phosphate buffer at pH 6, 10°C.

	H6/H8				
	2a	2b	2c	2d	2e
G1	0,14	0,14	0,11	0,15	0,11
C2	0,07	0,06	0,04	0,07	0,04
G3	0,04	0,03	0,03	0,04	0,03
A4	0,03	0,02	0,02	0,03	0,02
T5	0,03	0,02	0,02	0,03	0,02
C6	0,02	0,03	0,02	0,03	0,02
G7	0,03	0,03	0,02	0,04	0,03
C8	0,05	0,06	0,04	0,06	0,04

Table 4S. Chemical shift changes for H2' protons of d(GCGATCGC)₂ (1 eq.) on addition of **2** (2 eq.) in aq. phosphate buffer at pH 6, 10°C.

	H2'				
	2a	2b	2c	2d	2e
G1	0,13	0,12	0,09	0,13	0,09
C2	0,04	0,04	0,03	0,05	0,04
G3	0,03	0,03	0,02	0,03	0,03
A4	0,02	0,02	0,01	0,02	0,01
T5	0,02	0,02	0,02	0,03	0,02
C6	0,01	0,02	0,01	0,02	0,02
G7	0,01	0,02	0,01	0,02	0,01
C8	-0,01	-0,02	-0,01	-0,01	-0,01