

## ELECTRONIC SUPPLEMENTARY INFORMATION

### Features of the conformation of galunisertib molecules in the crystal structures of its solvates

Viktor N. Serezhkin,\* Anton V. Savchenkov

*Samara National Research University, Samara, Russian Federation*

\* *E-mail:* [serezhkin@samsu.ru](mailto:serezhkin@samsu.ru)

The following Tables S1 and S2 include these characteristics of atomic interactions:

- $k$  – the number of pyramids representing interatomic contacts of a given type;
- $d_{\min}$  and  $d_{\max}$  (Å) – distances for the shortest and the longest contact respectively;
- $S$  (Å<sup>2</sup>) – the total surface area of all faces corresponding to the given type of contacts;
- $V$  (Å<sup>3</sup>) – the total volume of all pyramids corresponding to the given type of contacts;
- $\Delta_S$  (%) – partial contributions of contacts to the total surface area of the corresponding faces.

The last column  $\Sigma$  shows the cumulative values for each molecule.

Table S1. Characteristics of chemical bonds of GAL molecules in different GAL·Q solvates (VD polyhedra faces with RF = 1)

Solvate	Solvent molecule		H/C	C/C	H/N	C/N	N/N	C/O	$\Sigma$
sI	H <sub>2</sub> O	<i>k</i>	34	44	4	16	2	2	102
		<i>d</i> <sub>min</sub>	0.95	1.36	0.88	1.32	1.34	1.24	0.88
		<i>d</i> <sub>max</sub>	0.99	1.56	0.88	1.46	1.34	1.24	1.56
		<i>S</i>	183.07	290.21	22.04	100.04	12.94	13.67	621.98
		<i>V</i>	29.40	68.70	3.23	22.49	2.90	2.83	129.55
		$\Delta_S$	29.43	46.66	3.54	16.08	2.08	2.20	100.00
sII	CH <sub>4</sub> O	<i>k</i>	34	44	4	16	2	2	102
		<i>d</i> <sub>min</sub>	0.95	1.37	0.89	1.32	1.35	1.24	0.89
		<i>d</i> <sub>max</sub>	0.99	1.55	0.91	1.46	1.35	1.24	1.55
		<i>S</i>	174.65	275.10	22.86	98.48	13.67	13.61	598.37
		<i>V</i>	28.08	65.32	3.42	22.20	3.07	2.82	124.91
		$\Delta_S$	29.19	45.97	3.82	16.46	2.28	2.27	100.00
sIII	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O	<i>k</i>	34	44	4	16	2	2	102
		<i>d</i> <sub>min</sub>	0.93	1.36	0.91	1.31	1.33	1.24	0.91
		<i>d</i> <sub>max</sub>	0.97	1.55	0.93	1.46	1.33	1.24	1.55
		<i>S</i>	185.25	285.56	23.66	105.98	13.14	14.53	628.11
		<i>V</i>	29.11	67.31	3.63	23.80	2.92	2.99	129.76
		$\Delta_S$	29.49	45.46	3.77	16.87	2.09	2.31	100.00
sIV	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O	<i>k</i>	34	44	4	16	2	2	102
		<i>d</i> <sub>min</sub>	0.95	1.36	0.88	1.32	1.35	1.24	0.88
		<i>d</i> <sub>max</sub>	0.99	1.55	0.88	1.46	1.35	1.24	1.55
		<i>S</i>	186.26	267.67	23.06	95.07	11.72	13.48	597.25
		<i>V</i>	29.90	63.50	2.38	21.41	2.63	2.78	122.61
		$\Delta_S$	31.19	44.82	3.86	15.92	1.96	2.26	100.00
sV	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> O	<i>k</i>	34	44	4	16	2	2	102
		<i>d</i> <sub>min</sub>	0.95	1.37	0.88	1.32	1.35	1.24	0.88
		<i>d</i> <sub>max</sub>	0.99	1.55	0.88	1.46	1.35	1.24	1.55
		<i>S</i>	184.71	275.96	22.37	97.14	11.70	14.60	606.49
		<i>V</i>	29.66	65.28	3.28	21.86	2.63	3.01	125.72
		$\Delta_S$	30.46	45.50	3.69	16.02	1.93	2.41	100.00
sVI	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> O	<i>k</i>	34	44	4	16	2	2	102
		<i>d</i> <sub>min</sub>	0.95	1.37	0.88	1.32	1.35	1.24	0.88
		<i>d</i> <sub>max</sub>	0.99	1.52	0.88	1.46	1.35	1.24	1.52
		<i>S</i>	182.52	278.58	21.59	100.10	11.91	13.28	607.99
		<i>V</i>	29.31	66.00	3.17	22.54	2.68	2.74	126.44
		$\Delta_S$	30.02	45.82	3.55	16.46	1.96	2.18	100.00
sVIIa	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> O	<i>k</i>	34	44	4	16	2	2	102
		<i>d</i> <sub>min</sub>	0.95	1.37	0.88	1.32	1.35	1.25	0.88
		<i>d</i> <sub>max</sub>	0.99	1.54	0.88	1.47	1.35	1.25	1.54
		<i>S</i>	181.27	280.54	22.05	100.48	12.70	12.89	609.94
		<i>V</i>	29.11	66.40	3.24	22.63	2.86	2.68	126.92
		$\Delta_S$	29.72	45.99	3.62	16.47	2.08	2.11	100.00
sVIIb	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> O	<i>k</i>	34	44	4	16	2	2	102
		<i>d</i> <sub>min</sub>	0.95	1.37	0.88	1.32	1.35	1.24	0.88
		<i>d</i> <sub>max</sub>	0.99	1.55	0.88	1.45	1.35	1.24	1.55
		<i>S</i>	180.77	280.18	22.93	100.84	12.10	13.31	610.12
		<i>V</i>	29.03	66.39	3.36	22.72	2.72	2.75	126.97
		$\Delta_S$	29.63	45.92	3.76	16.53	1.98	2.18	100.00
sVIII	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> O	<i>k</i>	34	44	4	16	2	2	102
		<i>d</i> <sub>min</sub>	0.95	1.37	0.89	1.32	1.35	1.24	0.89
		<i>d</i> <sub>max</sub>	0.99	1.55	0.89	1.46	1.35	1.24	1.55
		<i>S</i>	181.58	282.19	22.65	96.65	11.90	13.87	608.84
		<i>V</i>	29.16	66.94	3.36	21.77	2.67	2.86	126.76
		$\Delta_S$	29.82	46.35	3.72	15.87	1.95	2.28	100.00

Table S1 (continued)

Solvate	Solvent molecule		H/C	C/C	H/N	C/N	N/N	C/O	$\Sigma$
sIX	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O	<i>k</i>	34	44	4	16	2	2	102
		<i>d</i> <sub>min</sub>	0.95	1.36	0.90	1.32	1.34	1.24	0.90
		<i>d</i> <sub>max</sub>	0.99	1.56	0.96	1.46	1.34	1.24	1.56
		<i>S</i>	181.03	274.56	22.01	98.05	12.85	13.39	601.88
		<i>V</i>	29.08	65.20	3.42	22.12	2.87	2.76	125.46
		$\Delta_S$	30.08	45.62	3.66	16.29	2.13	2.22	100.00
sX	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O	<i>k</i>	34	44	4	16	2	2	102
		<i>d</i> <sub>min</sub>	0.95	1.37	0.88	1.32	1.35	1.24	0.88
		<i>d</i> <sub>max</sub>	0.99	1.55	0.88	1.46	1.35	1.24	1.55
		<i>S</i>	179.28	280.43	23.34	95.74	12.62	13.18	604.58
		<i>V</i>	28.79	66.50	3.42	21.56	2.84	2.72	125.84
		$\Delta_S$	29.65	46.38	3.86	15.84	2.09	2.18	100.00
sXI	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> NO	<i>k</i>	34	44	4	16	2	2	102
		<i>d</i> <sub>min</sub>	0.95	1.37	0.89	1.32	1.35	1.24	0.89
		<i>d</i> <sub>max</sub>	0.99	1.55	0.95	1.47	1.35	1.24	1.55
		<i>S</i>	179.88	271.13	24.54	93.43	12.76	13.06	594.79
		<i>V</i>	28.89	64.25	3.74	21.05	2.87	2.70	123.51
		$\Delta_S$	30.24	45.58	4.13	15.71	2.14	2.20	100.00

Table S2. Characteristics of intramolecular noncovalent interactions of GAL molecules in different GAL·Q solvates (VD polyhedra faces with RF > 1)

Solvate	Solvent molecule		H/H	H/C	C/C	H/N	C/N	N/N	H/O	C/O	N/O	O/O	$\Sigma$
sI	H <sub>2</sub> O	<i>k</i>	48	126	42	24	28		4	2			274
		<i>d</i> <sub>min</sub>	1.52	1.93	2.29	1.95	2.11		2.45	2.37			1.52
		<i>d</i> <sub>max</sub>	4.09	4.88	3.23	3.32	3.73		2.46	2.37			4.88
		<i>S</i>	116.41	78.35	4.66	35.12	16.50		8.83	0.27			260.12
		<i>V</i>	40.89	34.93	1.93	15.01	7.95		3.62	0.11			104.44
		$\Delta_S$	44.75	30.12	1.79	13.50	6.34		3.39	0.10			100.00
sII	CH <sub>4</sub> O	<i>k</i>	46	112	34	28	24		4	2			250
		<i>d</i> <sub>min</sub>	1.52	1.93	2.21	1.96	2.11		2.46	2.37			1.52
		<i>d</i> <sub>max</sub>	4.13	4.26	3.25	3.91	3.19		2.46	2.37			4.26
		<i>S</i>	113.18	59.39	3.37	33.47	13.15		9.27	0.40			232.22
		<i>V</i>	39.50	24.66	1.35	13.84	6.13		3.79	0.16			89.43
		$\Delta_S$	48.74	25.58	1.45	14.41	5.66		3.99	0.17			100.00
sIII	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O	<i>k</i>	48	126	36	28	24		6	12			280
		<i>d</i> <sub>min</sub>	1.57	1.90	2.20	1.92	2.10		2.39	2.36			1.57
		<i>d</i> <sub>max</sub>	4.25	4.70	4.27	4.49	3.07		4.68	4.47			4.70
		<i>S</i>	133.97	98.85	4.71	41.99	13.76		11.23	6.31			310.81
		<i>V</i>	47.19	45.05	1.99	17.97	6.48		4.64	4.25			127.56
		$\Delta_S$	43.10	31.80	1.52	13.51	4.43		3.61	2.03			100.00
sIV	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O	<i>k</i>	54	116	50	24	26		4	2			276
		<i>d</i> <sub>min</sub>	1.52	1.93	2.21	1.95	2.11		2.45	2.38			1.52
		<i>d</i> <sub>max</sub>	4.50	4.23	4.62	4.23	4.36		2.46	2.38			4.62
		<i>S</i>	140.96	85.30	6.46	26.48	14.10		11.31	0.02			284.62
		<i>V</i>	50.34	38.79	3.37	10.92	6.68		4.63	0.01			114.72
		$\Delta_S$	49.53	29.97	2.27	9.30	4.95		3.97	0.01			100.00
sV	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> O	<i>k</i>	48	126	40	28	28		4	10			284
		<i>d</i> <sub>min</sub>	1.52	1.93	2.21	1.95	2.11		2.45	2.37			1.52
		<i>d</i> <sub>max</sub>	3.89	4.29	4.17	3.75	3.07		2.47	4.58			4.58
		<i>S</i>	110.07	89.74	5.58	28.07	13.42		12.03	5.60			264.49
		<i>V</i>	38.76	39.21	2.67	11.53	6.25		4.92	3.60			106.93
		$\Delta_S$	41.62	33.93	2.11	10.61	5.07		4.55	2.12			100.00

Table S2 (continued)

Solvate	Solvent molecule		H/H	H/C	C/C	H/N	C/N	N/N	H/O	C/O	N/O	O/O	$\Sigma$
sVI	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> O	<i>k</i>	46	116	40	26	24.00		4	6			262
		<i>d</i> <sub>min</sub>	1.52	1.93	2.21	1.95	2.11		2.42	2.37			1.52
		<i>d</i> <sub>max</sub>	3.60	4.01	3.78	4.08	3.09		2.46	4.53			4.53
		<i>S</i>	114.01	80.24	3.95	31.61	12.73		11.59	2.34			256.47
		<i>V</i>	39.88	34.85	1.64	12.99	5.98		4.69	1.59			101.62
		$\Delta_S$	44.45	31.29	1.54	12.33	4.96		4.52	0.91			100.00
sVIIa	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> O	<i>k</i>	42	116	34	28	22		4	12			258
		<i>d</i> <sub>min</sub>	1.52	1.93	2.21	1.96	2.11		2.46	2.37			1.52
		<i>d</i> <sub>max</sub>	3.22	4.75	3.82	4.82	3.13		2.46	4.65			4.82
		<i>S</i>	117.72	81.52	4.71	32.62	13.86		11.22	1.80			263.45
		<i>V</i>	41.33	35.74	1.93	13.57	6.55		4.60	1.17			104.87
		$\Delta_S$	44.68	30.94	1.79	12.38	5.26		4.26	0.68			100.00
sVIIb	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> O	<i>k</i>	44	122	38	26	22		4	6			262
		<i>d</i> <sub>min</sub>	1.52	1.93	2.21	1.95	2.12		2.46	2.38			1.52
		<i>d</i> <sub>max</sub>	3.28	4.40	3.87	3.88	3.15		2.47	4.75			4.75
		<i>S</i>	112.70	80.73	4.63	35.14	13.57		11.13	0.96			258.86
		<i>V</i>	39.79	35.03	1.99	14.68	6.39		4.58	0.54			102.98
		$\Delta_S$	43.54	31.19	1.79	13.57	5.24		4.30	0.37			100.00
sVIII	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> O	<i>k</i>	44	120	36	26	22		4	6			258
		<i>d</i> <sub>min</sub>	1.53	1.92	2.21	1.95	2.11		2.40	2.37			1.53
		<i>d</i> <sub>max</sub>	3.27	4.46	3.78	4.08	3.12		2.43	4.47			4.47
		<i>S</i>	103.81	76.60	4.69	28.73	14.35		11.20	1.13			240.53
		<i>V</i>	36.44	33.22	2.01	11.90	6.80		4.49	0.76			95.63
		$\Delta_S$	43.16	31.85	1.95	11.94	5.97		4.66	0.47			100.00
sIX	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O	<i>k</i>	50	108	36	26	22		4	2			248
		<i>d</i> <sub>min</sub>	1.56	1.93	2.21	1.95	2.11		2.42	2.38			1.56
		<i>d</i> <sub>max</sub>	4.26	4.17	2.80	3.78	3.09		2.46	2.38			4.26
		<i>S</i>	107.38	54.99	3.18	33.51	11.64		10.19	0.07			220.96
		<i>V</i>	37.32	22.74	1.27	14.24	5.42		4.17	0.03			85.20
		$\Delta_S$	48.59	24.89	1.44	15.16	5.27		4.61	0.03			100.00
sX	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O	<i>k</i>	48	100	38	20	24		4	2			236
		<i>d</i> <sub>min</sub>	1.52	1.93	2.21	1.95	2.12		2.44	2.37			1.52
		<i>d</i> <sub>max</sub>	3.26	4.69	3.23	3.32	4.05		2.45	2.37			4.69
		<i>S</i>	116.04	57.12	3.67	27.72	10.65		11.49	0.09			226.78
		<i>V</i>	41.45	23.18	1.47	10.96	5.10		4.67	0.04			86.87
		$\Delta_S$	51.17	25.19	1.62	12.22	4.69		5.07	0.04			100.00

Table S2 (continued)

Solvate	Solvent molecule		H/H	H/C	C/C	H/N	C/N	N/N	H/O	C/O	N/O	O/O	$\Sigma$
sXI	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> NO	<i>k</i>	46	104	48	26	26		4	2			256
		<i>d</i> <sub>min</sub>	1.58	1.96	2.21	1.95	2.12		2.43	2.37			1.58
		<i>d</i> <sub>max</sub>	3.44	4.49	3.21	4.13	3.83		2.47	2.37			4.49
		<i>S</i>	119.38	60.37	3.39	33.05	11.84		9.30	0.21			237.53
		<i>V</i>	41.98	25.92	1.37	13.67	5.70		3.82	0.08			92.53
		$\Delta_S$	50.26	25.41	1.43	13.91	4.98		3.92	0.09			100.00