

Supplementary material

Table S1. Estimated free energy binding (EFE) and chemical interactions among the phenolic compounds present in sorghum flour.

Compound	AKT		p65-NFκB	
	EFE	Interacting amino acid residues	EFE	Interacting amino acid residues
<b>Catechin</b>	-6.2	LYS A: 419; LYS A: 289; LEU A: 210; GLUA: 228; SER A: 205; HIS A: 207; LEU A: 2013; ALA A: 476; ALA A: 212; LYS A: 214; ARG 2: 206; PRO A: 208	-7.2	GLU C: 211; CYS D: 240; PHE C: 213; ASP C: 243; VAL C: 251; ALA C: 242; ARG D: 275; HIS C: 245; ARG C: 246; GLY D: 273; TYR D: 272; MET D: 271; ARG D: 242; GLU D: 250
<b>Procyanidin B1</b>	-7.5	SER A: 475; ASP A: 473; GLN A: 203; TYR A: 472; SER A: 477; ALA A: 476; ARG A: 206; SER A: 478; ASN A: 199; LEU A: 196; PRO A: 470; PHE A: 472; ARG A: 200; GLN A: 471	<b>-8.9</b>	GLY D: 274; GLY D: 273; MET D: 271; THR D: 239; CYS D: 240; TYR D: 272; HIS C: 245; ARG C: 246; VAL C: 244; GLN C: 247; LYS C: 221; THR D: 276; ARG D: 275; PRO D: 301; GLY D: 279;

				LEU D: 282; LEU D: 283; ASP D: 303; GLY D: 304; GLU D: 302
<b>Procyanidin B2</b>	-7.2	ARG A: 174; LYS A: 214; TYR A: 175; TYR A: 176; LEU A: 213; TYR A: 229; ARG A: 206; ALA A: 476; SER A: 205; HIS A: 207; ALA A: 212; GLU A: 228	<b>-8.9</b>	LYS C: 221; GLN C: 247; VAL C: 244; ARG C: 246; GLY D: 273; HIS C: 245; CYS D: 240; TYR D: 272; GLY D: 279; LEU D: 282; THR D: 276; PRO D: 301; ASP D: 303; LEU D: 283; GLU D: 302; ARG D: 275; GLY D: 304; GLY D: 274
<b>Quercetin</b>	-6.3	ALA A: 212; LYS A: 214; ARG A: 206; ALA A: 476; LEU A: 213; SER A: 205; HIS A: 207; GLU A: 228; LYS A: 289; PRO A: 208; LYS A: 419	<b>-7.5</b>	ASP C: 243; ALA C: 242; ARG D: 275; HIS C: 245; ARG C: 246; GLY C: 273; TYR D: 272; MET D: 271; CYS D: 240; PHE C: 213; VAL C: 251; GLU C: 211; ARG D: 242; GLU D: 250
<b>Quercetin 3- glucoside</b>	-6.9	LYS A: 214; TYR A: 176; ARG A: 174; SER	<b>-8</b>	ARG 3: 246; VAL C: 244; ALA C: 242; LEU

		A: 205; HIS A: 207;		C: 215; ALA C: 249;
		LEU A: 210; ALA A:		HIS C: 245; PHE C:
		212; PRO A: 208; LYS		213; VAL C: 251; CYS
		A: 289LYS A: 419; GLU		C: 240; THR D: 239;
		A: 228; ARG A: 206;		ARG D: 242; GLU C:
		SER A: 477; ALA A:		211; GLU D: 250; ASP
		476; SER A: 478		C: 243; MET D: 271;
				GLY D: 273; TYR D:
				272; ARG D: 275
<b>Quercetin 3-</b>	<b>-8.0</b>	ARG A: 206; HIS A:	<b>-7.9</b>	ALA C: 242; ASP C:
<b>rutinoside</b>		207; ALA A: 212; LEU		243; MET D: 271; HIS
		A: 210; LYS A: 289;		C: 245; CYS D: 240;
		PRO A: 208; LYS A:		VAL C: 244; GLN C:
		419; GLU A: 228; TYR		241; GLY D: 273; ARG
		A: 176; LYS A: 214;		C: 246; LYS C: 221;
		ALA A: 476; SER A:		LEU D: 282; ARG D:
		477; ARG A: 174; SER		275; GLY D: 304; GLY
		A: 478		D: 274; ASP D: 303;
				PRO D: 301; GLY D:
				279; GLU D: 302; THR
				D: 276

---

EFE: Estimated free energy. Docking calculations were carried out using AutoDock Vina.

Negative values mean spontaneous reaction. Bold values represent the strongest interactions.