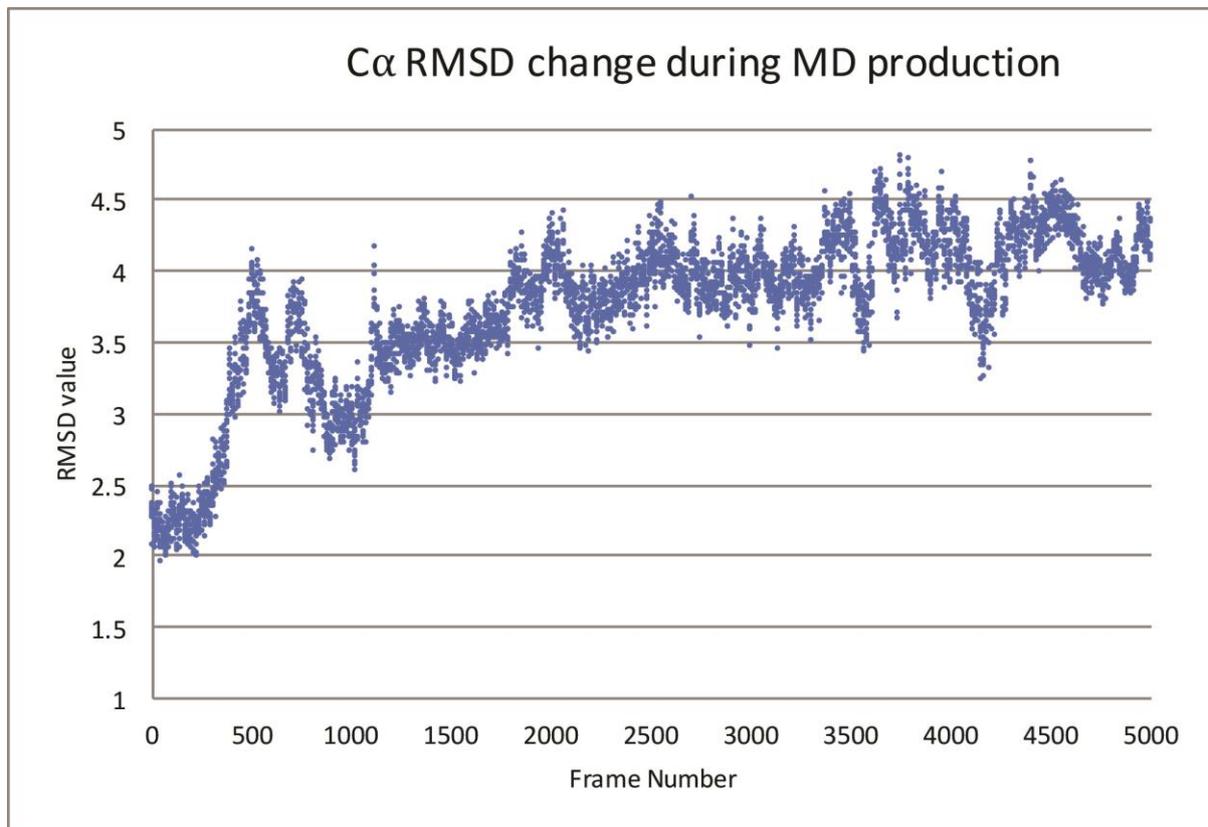


## Supplementary materials

**Supplementary Table 1 Human MCL-1 Structures in the PDB**

<b>PDB ID</b>	<b>Experimental Method</b>	<b>Ligand</b>
5FC4	X-RAY	Yes
5FDO	X-RAY	Yes
5FDR	X-RAY	Yes
4WMR	X-RAY	Yes
4WMS	X-RAY	Yes
4WMT	X-RAY	Yes
4WMU	X-RAY	Yes
4WMV	X-RAY	Yes
4WMW	X-RAY	Yes
4WMX	X-RAY	Yes
4ZBF	X-RAY	Yes
4ZBI	X-RAY	Yes
4WGI	X-RAY	Yes
2MHS	NMR	No
4BPI	X-RAY	Peptide
4BPJ	X-RAY	Peptide
4OQ5	X-RAY	Yes
4OQ6	X-RAY	Yes
3WIX	X-RAY	Yes
3WIY	X-RAY	Yes
4HW2	X-RAY	Yes
4HW3	X-RAY	Yes
4HW4	X-RAY	Peptide
3PK1	X-RAY	Peptide
3MK8	X-RAY	Peptide
3KZ0	X-RAY	Peptide
3KJ0	X-RAY	Peptide
3KJ1	X-RAY	Peptide
3KJ2	X-RAY	Peptide
2KBW	NMR	Peptide
3IO9	X-RAY	Peptide
3D7V	X-RAY	Peptide
2PQK	X-RAY	Peptide
2NL9	X-RAY	Peptide

Figure S1



































































ZINC97327663	-7.5	-4.8	-3.4	-2.6	-7.4	-7	-6.1	-3.6	-8.2	-3.1	-6.8	-0.8	-6.9	-4.5	-6	-2.3	-6.6	-6.1	-6.7	-7	-5.4	-7.1	-7.4	-6.9	-7.5	-7.3	-7.2	-7.3	-7.4	-7.1	1.90	
ZINC97378818	-7.7	-5.4	-4.8	-5.6	-6.9	-6.4	-6	-4	-8.5	-3.6	-6.8	-4.4	-6.4	-4.5	-7.1	-5.4	-5	-5.9	-6.6	-6.3	-3.8	-6.2	-6.8	-5.7	-7.4	-7.6	-7.2	-7.8	-7.7	-8	1.33	
ZINC97393745	-7.8	-6	-5.9	-5.6	-6.6	-5.7	-6.2	-6.1	-7.3	-5.1	-6.3	-5	-5.2	-6.7	-5.7	-5.2	-6.1	-5.9	-5.4	-6.9	-5	-7.2	-6	-5.7	-6.2	-6.3	-6.5	-7.4	-7.7	-7.9	0.84	
ZINC97402491	-7.8	-5.7	-5.2	-4.5	-7.5	-7.5	-6.5	-4.8	-7.8	-5.1	-7.4	-4.6	-6	-5.9	-6.5	-4.5	-6.1	-6.5	-7.7	-7.1	-4.2	-7	-6.7	-6.5	-7.3	-7.5	-7.5	-7.9	-7.6	-7.8	1.18	
ZINC97464432_1	-7.8	-3.6	-2.5	-0.7	-7.1	-6.5	-5.3	-0.9	-8.4	-1.6	-7	-2.9	-6.2	-1.2	-6.2	-1.8	-5.2	-7.1	-7	-6.8	-4.5	-5.4	-7.2	-5.4	-7.5	-7	-7.5	-7.6	-7.4	-7.9	2.39	
ZINC97465105	-7.7	-5.4	-6	-5.4	-6	-5.4	-5.1	-5.4	-6.2	-4.6	-6.2	-4.6	-5.2	-7.1	-5.9	-5.5	-5.6	-5.8	-5.8	-5.4	-4.7	-5.9	-6.3	-5.8	-6.3	-6.4	-6	-6.6	-6.6	-6.5	0.70	
ZINC97490955_4	-7.7	-5.5	-3.3	-4.5	-6.8	-6.9	-7	-0.5	-8.4	1.2	-7.1	-3	-5.9	-1.2	-7.4	3.1	-5.8	-6.4	-7	-6.2	-4.7	-5.3	-6.6	-5.9	-7.4	-7.2	-7.4	-7.4	-7.3	-7.4	-7.3	2.79
ZINC97493870_1	-7.6	-6.3	-4.3	-4.2	-7.3	-7.4	-6.9	-3	-8.6	-3.6	-7.5	-0.9	-7	-0.8	-6.7	-2.8	-6.3	-7.2	-7.9	-7.3	-3.9	-6.2	-6.3	-5.6	-8.1	-7.5	-7.6	-7.8	-6.8	-7.6	-7.6	2.11
ZINC97493870_5	-7.3	-5.2	-4.1	-5	-7.6	-7.5	-6.7	-2.9	-8.1	-4.2	-7.7	-0.8	-6.7	-1.1	-7.1	-3.2	-6.3	-7.4	-7.9	-7.3	-3.8	-5.2	-6.3	-5.6	-8.1	-7.6	-7.5	-7.9	-7.5	-7.6	2.06	
ZINC97635156	-7.5	-6.2	-5.6	-5.4	-7.3	-6.8	-5.4	-6.3	-6.8	-5.4	-6.8	-6	-5.7	-5.9	-6.5	-5.6	-6.4	-6.5	-7	-6.1	-2.6	-6.5	-6.9	-6.4	-7.3	-6.9	-7.4	-7.3	-7.2	-7.7	0.98	
ZINC97700062	-7.4	-4.9	-4	-0.3	-7.7	-7.4	-6.3	-3.1	-8.1	-3.5	-7.6	-2.1	-6.9	-4.2	-6.8	-2.5	-5.9	-6.3	-7.3	-7.1	-2.9	-6	-7.3	-6.3	-7.1	-7.5	-7.1	-7.5	-7.7	-7.7	2.08	
ZINC97814964	-8.3	-4.6	-4	-3.6	-7.3	-6.6	-6.4	-3.6	-8.4	-4	-7	-2.7	-5.9	-4.9	-6.6	-1.5	-5.8	-6.3	-7.1	-6.4	-5	-6.6	-6.8	-6.8	-7.4	-7.8	-8.1	-7.7	-8.4	-8.3	1.82	
ZINC98114689	-7.4	-4.5	-3.9	-1.8	-6	-5.8	-5.7	-2.6	-7	-1.4	-5.9	-2.6	-6.3	-3.8	-6.1	0.5	-5.2	-6.1	-6.1	-6.2	-4	-5.9	-7.4	-5.3	-6.9	-6.9	-7.1	-7.5	-7.3	-7.6	2.05	
ZINC98114752	-7.5	-4.3	-1.3	-1.5	-6	-5.7	-5.4	-2.6	-7.1	-2.2	-6.2	-2.6	-5.3	-1.6	-6	-1.6	-5.5	-5.4	-6.3	-5.9	-3.2	-5.7	-7.1	-5.3	-6.9	-7.2	-6	-7.4	-7.2	-7.2	2.03	
ZINC98115265	-6.9	-4.9	-4	-3.4	-6.8	-7	-5.7	-4.8	-8.1	-3.2	-6.9	-1.5	-6.9	-4.8	-6.5	-4	-6.8	-5.6	-6.6	-6.2	-3.6	-6.7	-7.1	-6.7	-7.2	-7.1	-7.3	-7.8	-7.5	-7.7	1.64	
ZINC98150430_3	-7.4	-6.5	-3.8	-5.1	-7.5	-7.4	-7.2	-3.4	-8.9	-3.1	-8.1	-1	-8	-3	-8	-3.2	-7.2	-7.4	-7.4	-6.8	-3.9	-6	-7.1	-5.2	-8	-7.9	-8.4	-8.3	-8.5	-8.5	2.12	
ZINC98150430_5	-8.7	-6.1	-3	-4.6	-7.4	-7.4	-6.1	-2.2	-8.8	-3.4	-8	0.9	-7.7	-2.2	-7.4	-2.5	-7	-6.5	-7.5	-6.3	-4.5	-6.6	-7.2	-5.9	-8.5	-8.4	-8.4	-8.7	-8.5	-8.8	2.49	
ZINC98150430_7	-8.7	-6.3	-3.8	-4.4	-7.2	-6.4	-7.1	-3.4	-8.5	-0.5	-8.2	-6.2	-7.4	-1.7	-7.3	-2.8	-7	-6.9	-7.9	-6.3	-5.8	-6.3	-7.2	-6.8	-8.5	-7.9	-8.4	-8.7	-8.6	-8.9	2.17	
ZINC98150436_1	-7.9	-6	-3	-1.9	-6.8	-7.2	-7	-2.4	-8.1	-3.8	-7.2	-3.7	-7.6	-2.2	-7.4	-2.4	-6.4	-5.6	-7.1	-7	-3.3	-6.2	-6.6	-5.7	-7.7	-6.9	-7.6	-8	-7.7	-8	2.04	
ZINC98150436_5	-7.9	-6.2	-2.9	-3.4	-7.6	-7.3	-6.3	-1.9	-8.3	-5.1	-7.8	-4.3	-7.3	-1.3	-7.7	-2.1	-6.6	-6.9	-7.3	-7	-4.3	-6.3	-6.7	-5.3	-7.9	-7.4	-7.7	-8	-7.9	-8.2	2.06	
ZINC98150436_7	-8	-6.2	-3.9	-4.9	-7.6	-7	-6.6	-2.3	-8.1	-4	-7.7	-4.2	-7.3	-1.9	-7.5	-3.5	-6.6	-6.6	-7.2	-6.9	-5.9	-6.4	-6.7	-4.8	-7.8	-7.3	-7.8	-7.9	-8	-8.2	1.78	
ZINC98150470	-8	-6.2	-4	-4.5	-7.2	-7.1	-6.5	-1.8	-8.1	-1.2	-7.2	-3.3	-6.6	1.9	-6.7	-2.3	-6	-6.3	-7	-6.6	-3.9	-6.5	-6.3	-4.8	-7.7	-7.7	-8.2	-8.2	-8.2	-8.2	2.46	
ZINC98161534	-7.7	-5.9	-5.7	-2.2	-7.3	-6.5	-6.4	-3.3	-8.1	-2.9	-7.3	-1.3	-6.3	-2.9	-6.3	-3.3	-7.3	-6.2	-6.7	-6.1	-5.4	-7.2	-6.7	-6	-7.2	-7.3	-7.5	-8	-7.5	-7.9	1.87	
ZINC98161549	-7.8	-3.2	-2.7	-2.9	-7.4	-7.2	-6.4	0.5	-8.3	-0.3	-8.1	0.8	-6.7	0.7	-6.7	-0.9	-5.3	-6.7	-7.3	-6.9	-4.1	-6.9	-7	-5.5	-7.1	-7.3	-7.4	-7.3	-7.4	-7.9	2.92	