

Table S2. Listing of 3.5 Å close contacts between amino acids of human P-glycoprotein and docked ligands.

Any contact between protein and ligand that was less than or equal to 3.5 Å is listed in the table under its contacted amino acid number, the nonredundant molecular dynamics frame number from which the contact was detected, and the contacted Pgp residue type, number and helix.

Contact residue/ ligand	MD trajectory frame number	Pgp amino acid residue	Pgp residue number	Helix number
60				
biricodar	22	ILE	60	1
cyclosporinA	18	ILE	60	1
cyclosporinA	20	ILE	60	1
cyclosporinA	21	ILE	60	1
paclitaxel	15	ILE	60	1
paclitaxel	17	ILE	60	1
valspodar	17	ILE	60	1
valspodar	19	ILE	60	1
valspodar	20	ILE	60	1
valspodar	21	ILE	60	1
63				
cisZ- flupenthixol	18	ALA	63	1
cyclosporinA	18	ALA	63	1
cyclosporinA	20	ALA	63	1
doxorubicin	18	ALA	63	1
elacridar	24	ALA	63	1
elacridar	25	ALA	63	1
lopinavir	15	ALA	63	1
paclitaxel	15	ALA	63	1
paclitaxel	17	ALA	63	1
paclitaxel	24	ALA	63	1
paclitaxel	25	ALA	63	1
QZ59S_RRR	14	ALA	63	1
QZ59S_SSS	23	ALA	63	1
rhodamine123	19	ALA	63	1
saquinavir	25	ALA	63	1
valspodar	21	ALA	63	1
verapamil	18	ALA	63	1
64				
biricodar	22	GLY	64	1
cyclosporinA	18	GLY	64	1
cyclosporinA	20	GLY	64	1
cyclosporinA	21	GLY	64	1
paclitaxel	15	GLY	64	1
paclitaxel	17	GLY	64	1
valspodar	17	GLY	64	1
valspodar	19	GLY	64	1

valspodar	20	GLY	64	1
valspodar	21	GLY	64	1
68				
biricodar	2	MET	68	1
biricodar	10	MET	68	1
biricodar	11	MET	68	1
biricodar	22	MET	68	1
cisZ-flupenthixol	0	MET	68	1
cisZ-flupenthixol	4	MET	68	1
cyclosporinA	9	MET	68	1
cyclosporinA	20	MET	68	1
cyclosporinA	21	MET	68	1
daunorubicin	2	MET	68	1
daunorubicin	10	MET	68	1
doxorubicin	1	MET	68	1
doxorubicin	2	MET	68	1
doxorubicin	3	MET	68	1
doxorubicin	9	MET	68	1
elacridar	1	MET	68	1
elacridar	2	MET	68	1
elacridar	3	MET	68	1
elacridar	4	MET	68	1
elacridar	6	MET	68	1
elacridar	7	MET	68	1
elacridar	10	MET	68	1
hoechst33342	0	MET	68	1
hoechst33342	8	MET	68	1
hoechst33342	9	MET	68	1
hoechst33342	12	MET	68	1
ivermectin	2	MET	68	1
ivermectin	3	MET	68	1
ivermectin	6	MET	68	1
ivermectin	8	MET	68	1
lopinavir	10	MET	68	1
lopinavir	11	MET	68	1
paclitaxel	7	MET	68	1
paclitaxel	15	MET	68	1
paclitaxel	17	MET	68	1
QZ59S_RRR	9	MET	68	1
QZ59S_RRR	14	MET	68	1
QZ59S_SSS	5	MET	68	1
rhodamine123	10	MET	68	1
ritonavir	4	MET	68	1
ritonavir	17	MET	68	1
saquinavir	3	MET	68	1
saquinavir	7	MET	68	1
saquinavir	10	MET	68	1
tamoxifen	2	MET	68	1
tamoxifen	3	MET	68	1

tamoxifen	10	MET	68	1
tariquidar	6	MET	68	1
tariquidar	10	MET	68	1
valspodar	7	MET	68	1
valspodar	17	MET	68	1
valspodar	19	MET	68	1
valspodar	21	MET	68	1
verapamil	2	MET	68	1
verapamil	3	MET	68	1
vinblastine	6	MET	68	1
vinblastine	7	MET	68	1
vinblastine	8	MET	68	1
vinblastine	9	MET	68	1
vinblastine	10	MET	68	1
zosuquidar	1	MET	68	1
zosuquidar	3	MET	68	1
zosuquidar	4	MET	68	1
218				
tamoxifen	24	ILE	218	4
222				
tamoxifen	24	SER	222	4
300				
biricodar	1	GLY	300	5
biricodar	3	GLY	300	5
biricodar	4	GLY	300	5
biricodar	9	GLY	300	5
cisZ- flupenthixol	8	GLY	300	5
cisZ- flupenthixol	9	GLY	300	5
cyclosporinA	3	GLY	300	5
cyclosporinA	4	GLY	300	5
daunorubicin	4	GLY	300	5
daunorubicin	9	GLY	300	5
daunorubicin	25	GLY	300	5
doxorubicin	0	GLY	300	5
elacridar	0	GLY	300	5
elacridar	5	GLY	300	5
elacridar	8	GLY	300	5
elacridar	13	GLY	300	5
ivermectin	2	GLY	300	5
ivermectin	4	GLY	300	5
ivermectin	5	GLY	300	5
ivermectin	6	GLY	300	5
ivermectin	7	GLY	300	5
ivermectin	9	GLY	300	5
lopinavir	2	GLY	300	5
lopinavir	3	GLY	300	5
lopinavir	5	GLY	300	5

lopinavir	6	GLY	300	5
lopinavir	7	GLY	300	5
lopinavir	14	GLY	300	5
paclitaxel	1	GLY	300	5
paclitaxel	3	GLY	300	5
paclitaxel	4	GLY	300	5
paclitaxel	5	GLY	300	5
paclitaxel	6	GLY	300	5
paclitaxel	8	GLY	300	5
QZ59S_RRR	3	GLY	300	5
QZ59S_RRR	7	GLY	300	5
QZ59S_SSS	4	GLY	300	5
QZ59S_SSS	14	GLY	300	5
QZ59S_SSS	15	GLY	300	5
QZ59S_SSS	16	GLY	300	5
rhodamine123	9	GLY	300	5
ritonavir	0	GLY	300	5
ritonavir	2	GLY	300	5
ritonavir	5	GLY	300	5
ritonavir	6	GLY	300	5
ritonavir	8	GLY	300	5
ritonavir	9	GLY	300	5
ritonavir	14	GLY	300	5
ritonavir	21	GLY	300	5
saquinavir	1	GLY	300	5
saquinavir	4	GLY	300	5
saquinavir	5	GLY	300	5
saquinavir	8	GLY	300	5
tamoxifen	4	GLY	300	5
tamoxifen	8	GLY	300	5
tariquidar	1	GLY	300	5
tariquidar	3	GLY	300	5
tariquidar	4	GLY	300	5
tariquidar	6	GLY	300	5
tariquidar	8	GLY	300	5
valspodar	0	GLY	300	5
valspodar	3	GLY	300	5
valspodar	4	GLY	300	5
valspodar	5	GLY	300	5
valspodar	7	GLY	300	5
verapamil	0	GLY	300	5
verapamil	8	GLY	300	5
verapamil	16	GLY	300	5
vinblastine	3	GLY	300	5
vinblastine	4	GLY	300	5
vinblastine	5	GLY	300	5
zosuquidar	0	GLY	300	5
zosuquidar	11	GLY	300	5
zosuquidar	25	GLY	300	5
302				
cisZ-	13	ALA	302	5

flupenthixol				
cisZ-flupenthixol	14	ALA	302	5
cisZ-flupenthixol	15	ALA	302	5
cisZ-flupenthixol	16	ALA	302	5
daunorubicin	13	ALA	302	5
elacridar	13	ALA	302	5
elacridar	15	ALA	302	5
elacridar	16	ALA	302	5
hoechst33342	15	ALA	302	5
hoechst33342	16	ALA	302	5
ivermectin	12	ALA	302	5
ivermectin	16	ALA	302	5
QZ59S_RRR	15	ALA	302	5
rhodamine123	11	ALA	302	5
rhodamine123	12	ALA	302	5
rhodamine123	17	ALA	302	5
ritonavir	14	ALA	302	5
ritonavir	16	ALA	302	5
saquinavir	16	ALA	302	5
tamoxifen	11	ALA	302	5
tamoxifen	12	ALA	302	5
tamoxifen	16	ALA	302	5
verapamil	12	ALA	302	5
zosuquidar	13	ALA	302	5
306				
biricodar	12	ILE	306	5
cisZ-flupenthixol	13	ILE	306	5
cisZ-flupenthixol	14	ILE	306	5
cisZ-flupenthixol	15	ILE	306	5
cisZ-flupenthixol	16	ILE	306	5
daunorubicin	12	ILE	306	5
daunorubicin	13	ILE	306	5
doxorubicin	12	ILE	306	5
elacridar	12	ILE	306	5
lopinavir	12	ILE	306	5
QZ59S_RRR	11	ILE	306	5
QZ59S_RRR	12	ILE	306	5
QZ59S_RRR	13	ILE	306	5
QZ59S_SSS	12	ILE	306	5
rhodamine123	13	ILE	306	5
tamoxifen	16	ILE	306	5
tamoxifen	24	ILE	306	5
verapamil	1	ILE	306	5
verapamil	14	ILE	306	5

vinblastine	12	ILE	306	5
zosuquidar	11	ILE	306	5
zosuquidar	12	ILE	306	5
332				
biricodar	8	LEU	332	6
biricodar	11	LEU	332	6
biricodar	13	LEU	332	6
cisZ-flupenthixol	1	LEU	332	6
cisZ-flupenthixol	2	LEU	332	6
cisZ-flupenthixol	4	LEU	332	6
cisZ-flupenthixol	5	LEU	332	6
cisZ-flupenthixol	10	LEU	332	6
cisZ-flupenthixol	17	LEU	332	6
cisZ-flupenthixol	21	LEU	332	6
cisZ-flupenthixol	22	LEU	332	6
daunorubicin	1	LEU	332	6
daunorubicin	3	LEU	332	6
daunorubicin	8	LEU	332	6
daunorubicin	11	LEU	332	6
daunorubicin	12	LEU	332	6
daunorubicin	14	LEU	332	6
daunorubicin	17	LEU	332	6
daunorubicin	22	LEU	332	6
doxorubicin	8	LEU	332	6
doxorubicin	13	LEU	332	6
doxorubicin	15	LEU	332	6
doxorubicin	22	LEU	332	6
elacridar	12	LEU	332	6
elacridar	14	LEU	332	6
hoechst33342	0	LEU	332	6
hoechst33342	5	LEU	332	6
hoechst33342	11	LEU	332	6
hoechst33342	13	LEU	332	6
hoechst33342	14	LEU	332	6
hoechst33342	17	LEU	332	6
hoechst33342	18	LEU	332	6
lopinavir	12	LEU	332	6
lopinavir	13	LEU	332	6
QZ59S_RRR	16	LEU	332	6
QZ59S_RRR	17	LEU	332	6
QZ59S_RRR	20	LEU	332	6
QZ59S_SSS	8	LEU	332	6
rhodamine123	4	LEU	332	6

rhodamine123	7	LEU	332	6
rhodamine123	13	LEU	332	6
rhodamine123	14	LEU	332	6
rhodamine123	15	LEU	332	6
saquinavir	13	LEU	332	6
tamoxifen	1	LEU	332	6
tamoxifen	3	LEU	332	6
tamoxifen	5	LEU	332	6
tamoxifen	10	LEU	332	6
tamoxifen	13	LEU	332	6
tamoxifen	15	LEU	332	6
tariquidar	0	LEU	332	6
tariquidar	9	LEU	332	6
tariquidar	10	LEU	332	6
verapamil	3	LEU	332	6
verapamil	4	LEU	332	6
verapamil	5	LEU	332	6
verapamil	6	LEU	332	6
verapamil	7	LEU	332	6
verapamil	14	LEU	332	6
verapamil	21	LEU	332	6
verapamil	22	LEU	332	6
zosuquidar	9	LEU	332	6
zosuquidar	10	LEU	332	6
zosuquidar	12	LEU	332	6
zosuquidar	16	LEU	332	6
zosuquidar	21	LEU	332	6
zosuquidar	22	LEU	332	6
335				
biricodar	8	PHE	335	6
336				
biricodar	0	PHE	336	6
biricodar	5	PHE	336	6
biricodar	6	PHE	336	6
biricodar	8	PHE	336	6
biricodar	10	PHE	336	6
biricodar	11	PHE	336	6
biricodar	13	PHE	336	6
cisZ-flupenthixol	0	PHE	336	6
cisZ-flupenthixol	2	PHE	336	6
cisZ-flupenthixol	4	PHE	336	6
cisZ-flupenthixol	5	PHE	336	6
cisZ-flupenthixol	6	PHE	336	6
cisZ-flupenthixol	7	PHE	336	6

cisZ-flupenthixol	10	PHE	336	6
cisZ-flupenthixol	17	PHE	336	6
cisZ-flupenthixol	20	PHE	336	6
cisZ-flupenthixol	21	PHE	336	6
cisZ-flupenthixol	22	PHE	336	6
cyclosporinA	7	PHE	336	6
cyclosporinA	10	PHE	336	6
daunorubicin	1	PHE	336	6
daunorubicin	2	PHE	336	6
daunorubicin	3	PHE	336	6
daunorubicin	5	PHE	336	6
daunorubicin	6	PHE	336	6
daunorubicin	7	PHE	336	6
daunorubicin	12	PHE	336	6
daunorubicin	17	PHE	336	6
daunorubicin	20	PHE	336	6
daunorubicin	22	PHE	336	6
doxorubicin	1	PHE	336	6
doxorubicin	2	PHE	336	6
doxorubicin	5	PHE	336	6
doxorubicin	8	PHE	336	6
doxorubicin	10	PHE	336	6
doxorubicin	12	PHE	336	6
doxorubicin	13	PHE	336	6
doxorubicin	15	PHE	336	6
doxorubicin	16	PHE	336	6
doxorubicin	22	PHE	336	6
elacridar	1	PHE	336	6
elacridar	2	PHE	336	6
elacridar	3	PHE	336	6
elacridar	4	PHE	336	6
elacridar	5	PHE	336	6
elacridar	9	PHE	336	6
elacridar	12	PHE	336	6
elacridar	14	PHE	336	6
elacridar	20	PHE	336	6
elacridar	21	PHE	336	6
hoechst33342	0	PHE	336	6
hoechst33342	2	PHE	336	6
hoechst33342	4	PHE	336	6
hoechst33342	5	PHE	336	6
hoechst33342	6	PHE	336	6
hoechst33342	7	PHE	336	6
hoechst33342	11	PHE	336	6
hoechst33342	13	PHE	336	6
hoechst33342	14	PHE	336	6
hoechst33342	17	PHE	336	6

hoechst33342	18	PHE	336	6
hoechst33342	22	PHE	336	6
ivermectin	0	PHE	336	6
ivermectin	1	PHE	336	6
ivermectin	2	PHE	336	6
ivermectin	3	PHE	336	6
ivermectin	5	PHE	336	6
ivermectin	6	PHE	336	6
ivermectin	7	PHE	336	6
ivermectin	8	PHE	336	6
ivermectin	13	PHE	336	6
ivermectin	14	PHE	336	6
lopinavir	10	PHE	336	6
lopinavir	12	PHE	336	6
lopinavir	13	PHE	336	6
lopinavir	14	PHE	336	6
paclitaxel	8	PHE	336	6
QZ59S_RRR	0	PHE	336	6
QZ59S_RRR	1	PHE	336	6
QZ59S_RRR	2	PHE	336	6
QZ59S_RRR	5	PHE	336	6
QZ59S_RRR	6	PHE	336	6
QZ59S_RRR	9	PHE	336	6
QZ59S_RRR	10	PHE	336	6
QZ59S_RRR	11	PHE	336	6
QZ59S_RRR	12	PHE	336	6
QZ59S_RRR	13	PHE	336	6
QZ59S_RRR	14	PHE	336	6
QZ59S_RRR	16	PHE	336	6
QZ59S_RRR	20	PHE	336	6
QZ59S_SSS	2	PHE	336	6
QZ59S_SSS	5	PHE	336	6
QZ59S_SSS	6	PHE	336	6
QZ59S_SSS	11	PHE	336	6
QZ59S_SSS	12	PHE	336	6
rhodamine123	1	PHE	336	6
rhodamine123	2	PHE	336	6
rhodamine123	3	PHE	336	6
rhodamine123	4	PHE	336	6
rhodamine123	5	PHE	336	6
rhodamine123	7	PHE	336	6
rhodamine123	13	PHE	336	6
rhodamine123	14	PHE	336	6
rhodamine123	15	PHE	336	6
rhodamine123	16	PHE	336	6
rhodamine123	21	PHE	336	6
rhodamine123	22	PHE	336	6
ritonavir	5	PHE	336	6
ritonavir	6	PHE	336	6
ritonavir	8	PHE	336	6
ritonavir	12	PHE	336	6
saquinavir	2	PHE	336	6

saquinavir	3	PHE	336	6
saquinavir	8	PHE	336	6
saquinavir	10	PHE	336	6
saquinavir	13	PHE	336	6
tamoxifen	1	PHE	336	6
tamoxifen	2	PHE	336	6
tamoxifen	3	PHE	336	6
tamoxifen	7	PHE	336	6
tamoxifen	10	PHE	336	6
tamoxifen	13	PHE	336	6
tamoxifen	15	PHE	336	6
tamoxifen	21	PHE	336	6
tamoxifen	22	PHE	336	6
tariquidar	0	PHE	336	6
tariquidar	4	PHE	336	6
tariquidar	7	PHE	336	6
tariquidar	8	PHE	336	6
tariquidar	10	PHE	336	6
tariquidar	13	PHE	336	6
tariquidar	16	PHE	336	6
tariquidar	21	PHE	336	6
valspodar	7	PHE	336	6
valspodar	9	PHE	336	6
verapamil	2	PHE	336	6
verapamil	3	PHE	336	6
verapamil	4	PHE	336	6
verapamil	5	PHE	336	6
verapamil	6	PHE	336	6
verapamil	7	PHE	336	6
verapamil	8	PHE	336	6
verapamil	9	PHE	336	6
verapamil	10	PHE	336	6
verapamil	14	PHE	336	6
verapamil	16	PHE	336	6
verapamil	18	PHE	336	6
verapamil	21	PHE	336	6
verapamil	22	PHE	336	6
vinblastine	6	PHE	336	6
vinblastine	7	PHE	336	6
vinblastine	9	PHE	336	6
vinblastine	10	PHE	336	6
vinblastine	12	PHE	336	6
vinblastine	24	PHE	336	6
zosuquidar	1	PHE	336	6
zosuquidar	3	PHE	336	6
zosuquidar	4	PHE	336	6
zosuquidar	9	PHE	336	6
zosuquidar	10	PHE	336	6
zosuquidar	16	PHE	336	6
zosuquidar	19	PHE	336	6
zosuquidar	20	PHE	336	6
zosuquidar	21	PHE	336	6

zosuquidar	22	PHE	336	6
338				
tamoxifen	0	VAL	338	6
tamoxifen	24	VAL	338	6
339				
biricodar	5	LEU	339	6
biricodar	6	LEU	339	6
biricodar	7	LEU	339	6
biricodar	8	LEU	339	6
biricodar	9	LEU	339	6
biricodar	11	LEU	339	6
biricodar	12	LEU	339	6
biricodar	18	LEU	339	6
cisZ-flupenthixol	2	LEU	339	6
cisZ-flupenthixol	6	LEU	339	6
cisZ-flupenthixol	7	LEU	339	6
cisZ-flupenthixol	8	LEU	339	6
cisZ-flupenthixol	9	LEU	339	6
cisZ-flupenthixol	13	LEU	339	6
cisZ-flupenthixol	14	LEU	339	6
cisZ-flupenthixol	15	LEU	339	6
cisZ-flupenthixol	16	LEU	339	6
cyclosporinA	7	LEU	339	6
cyclosporinA	10	LEU	339	6
daunorubicin	5	LEU	339	6
daunorubicin	6	LEU	339	6
daunorubicin	9	LEU	339	6
daunorubicin	12	LEU	339	6
daunorubicin	13	LEU	339	6
daunorubicin	20	LEU	339	6
doxorubicin	5	LEU	339	6
doxorubicin	12	LEU	339	6
elacridar	1	LEU	339	6
elacridar	2	LEU	339	6
elacridar	5	LEU	339	6
elacridar	8	LEU	339	6
elacridar	9	LEU	339	6
elacridar	12	LEU	339	6
elacridar	16	LEU	339	6
elacridar	20	LEU	339	6
hoechst33342	6	LEU	339	6

hoechst33342	7	LEU	339	6
hoechst33342	15	LEU	339	6
hoechst33342	16	LEU	339	6
ivermectin	0	LEU	339	6
ivermectin	2	LEU	339	6
ivermectin	4	LEU	339	6
ivermectin	7	LEU	339	6
ivermectin	8	LEU	339	6
ivermectin	11	LEU	339	6
ivermectin	12	LEU	339	6
ivermectin	13	LEU	339	6
ivermectin	14	LEU	339	6
ivermectin	15	LEU	339	6
ivermectin	16	LEU	339	6
ivermectin	20	LEU	339	6
ivermectin	21	LEU	339	6
lopinavir	1	LEU	339	6
lopinavir	10	LEU	339	6
lopinavir	12	LEU	339	6
lopinavir	14	LEU	339	6
lopinavir	16	LEU	339	6
paclitaxel	8	LEU	339	6
QZ59S_RRR	1	LEU	339	6
QZ59S_RRR	2	LEU	339	6
QZ59S_RRR	5	LEU	339	6
QZ59S_RRR	6	LEU	339	6
QZ59S_RRR	7	LEU	339	6
QZ59S_RRR	11	LEU	339	6
QZ59S_RRR	12	LEU	339	6
QZ59S_RRR	13	LEU	339	6
QZ59S_RRR	15	LEU	339	6
QZ59S_RRR	21	LEU	339	6
QZ59S_SSS	0	LEU	339	6
QZ59S_SSS	5	LEU	339	6
QZ59S_SSS	6	LEU	339	6
QZ59S_SSS	11	LEU	339	6
QZ59S_SSS	12	LEU	339	6
QZ59S_SSS	14	LEU	339	6
QZ59S_SSS	16	LEU	339	6
rhodamine123	1	LEU	339	6
rhodamine123	2	LEU	339	6
rhodamine123	11	LEU	339	6
rhodamine123	12	LEU	339	6
rhodamine123	13	LEU	339	6
rhodamine123	14	LEU	339	6
rhodamine123	15	LEU	339	6
rhodamine123	16	LEU	339	6
rhodamine123	18	LEU	339	6
rhodamine123	22	LEU	339	6
ritonavir	5	LEU	339	6
ritonavir	6	LEU	339	6
ritonavir	8	LEU	339	6

ritonavir	9	LEU	339	6
ritonavir	12	LEU	339	6
ritonavir	14	LEU	339	6
ritonavir	16	LEU	339	6
saquinavir	3	LEU	339	6
saquinavir	8	LEU	339	6
saquinavir	10	LEU	339	6
saquinavir	16	LEU	339	6
tamoxifen	7	LEU	339	6
tamoxifen	8	LEU	339	6
tamoxifen	11	LEU	339	6
tamoxifen	12	LEU	339	6
tamoxifen	16	LEU	339	6
tamoxifen	22	LEU	339	6
tariquidar	0	LEU	339	6
tariquidar	1	LEU	339	6
tariquidar	4	LEU	339	6
tariquidar	8	LEU	339	6
tariquidar	13	LEU	339	6
tariquidar	16	LEU	339	6
tariquidar	21	LEU	339	6
valspodar	7	LEU	339	6
valspodar	8	LEU	339	6
valspodar	9	LEU	339	6
valspodar	10	LEU	339	6
verapamil	0	LEU	339	6
verapamil	4	LEU	339	6
verapamil	5	LEU	339	6
verapamil	6	LEU	339	6
verapamil	7	LEU	339	6
verapamil	8	LEU	339	6
verapamil	12	LEU	339	6
verapamil	14	LEU	339	6
verapamil	16	LEU	339	6
vinblastine	6	LEU	339	6
vinblastine	7	LEU	339	6
vinblastine	9	LEU	339	6
vinblastine	10	LEU	339	6
vinblastine	12	LEU	339	6
zosuquidar	1	LEU	339	6
zosuquidar	4	LEU	339	6
zosuquidar	11	LEU	339	6
zosuquidar	12	LEU	339	6
zosuquidar	20	LEU	339	6
340				
biricodar	0	ILE	340	6
biricodar	2	ILE	340	6
biricodar	5	ILE	340	6
biricodar	6	ILE	340	6
biricodar	7	ILE	340	6
biricodar	11	ILE	340	6

biricodar	20	ILE	340	6
biricodar	23	ILE	340	6
cisZ-flupenthixol	21	ILE	340	6
cyclosporinA	4	ILE	340	6
cyclosporinA	7	ILE	340	6
cyclosporinA	10	ILE	340	6
cyclosporinA	12	ILE	340	6
cyclosporinA	13	ILE	340	6
cyclosporinA	15	ILE	340	6
cyclosporinA	17	ILE	340	6
daunorubicin	1	ILE	340	6
daunorubicin	2	ILE	340	6
daunorubicin	3	ILE	340	6
daunorubicin	18	ILE	340	6
daunorubicin	20	ILE	340	6
doxorubicin	1	ILE	340	6
doxorubicin	2	ILE	340	6
doxorubicin	3	ILE	340	6
doxorubicin	18	ILE	340	6
elacridar	1	ILE	340	6
elacridar	2	ILE	340	6
elacridar	4	ILE	340	6
elacridar	6	ILE	340	6
elacridar	15	ILE	340	6
elacridar	17	ILE	340	6
elacridar	18	ILE	340	6
elacridar	20	ILE	340	6
elacridar	21	ILE	340	6
elacridar	25	ILE	340	6
hoechst33342	6	ILE	340	6
hoechst33342	17	ILE	340	6
hoechst33342	18	ILE	340	6
hoechst33342	22	ILE	340	6
ivermectin	0	ILE	340	6
ivermectin	1	ILE	340	6
ivermectin	2	ILE	340	6
ivermectin	3	ILE	340	6
ivermectin	7	ILE	340	6
ivermectin	8	ILE	340	6
ivermectin	14	ILE	340	6
ivermectin	15	ILE	340	6
ivermectin	17	ILE	340	6
ivermectin	18	ILE	340	6
ivermectin	19	ILE	340	6
ivermectin	20	ILE	340	6
ivermectin	21	ILE	340	6
lopinavir	3	ILE	340	6
lopinavir	10	ILE	340	6
lopinavir	11	ILE	340	6
lopinavir	15	ILE	340	6
lopinavir	22	ILE	340	6

paclitaxel	10	ILE	340	6
QZ59S_RRR	0	ILE	340	6
QZ59S_RRR	2	ILE	340	6
QZ59S_RRR	14	ILE	340	6
QZ59S_RRR	19	ILE	340	6
QZ59S_RRR	21	ILE	340	6
QZ59S_SSS	0	ILE	340	6
QZ59S_SSS	2	ILE	340	6
QZ59S_SSS	7	ILE	340	6
QZ59S_SSS	22	ILE	340	6
QZ59S_SSS	23	ILE	340	6
rhodamine123	22	ILE	340	6
ritonavir	3	ILE	340	6
ritonavir	5	ILE	340	6
ritonavir	7	ILE	340	6
ritonavir	8	ILE	340	6
ritonavir	19	ILE	340	6
ritonavir	22	ILE	340	6
saquinavir	0	ILE	340	6
saquinavir	2	ILE	340	6
saquinavir	3	ILE	340	6
saquinavir	4	ILE	340	6
saquinavir	6	ILE	340	6
saquinavir	7	ILE	340	6
saquinavir	9	ILE	340	6
saquinavir	10	ILE	340	6
saquinavir	19	ILE	340	6
saquinavir	20	ILE	340	6
saquinavir	23	ILE	340	6
tamoxifen	1	ILE	340	6
tamoxifen	2	ILE	340	6
tamoxifen	7	ILE	340	6
tamoxifen	21	ILE	340	6
tamoxifen	22	ILE	340	6
tariquidar	0	ILE	340	6
tariquidar	2	ILE	340	6
tariquidar	13	ILE	340	6
tariquidar	16	ILE	340	6
tariquidar	21	ILE	340	6
valspodar	7	ILE	340	6
valspodar	8	ILE	340	6
valspodar	9	ILE	340	6
valspodar	10	ILE	340	6
valspodar	14	ILE	340	6
verapamil	2	ILE	340	6
verapamil	3	ILE	340	6
verapamil	6	ILE	340	6
verapamil	15	ILE	340	6
verapamil	16	ILE	340	6
verapamil	18	ILE	340	6
vinblastine	1	ILE	340	6
vinblastine	2	ILE	340	6

vinblastine	6	ILE	340	6
vinblastine	7	ILE	340	6
vinblastine	8	ILE	340	6
vinblastine	9	ILE	340	6
vinblastine	10	ILE	340	6
vinblastine	13	ILE	340	6
vinblastine	14	ILE	340	6
vinblastine	16	ILE	340	6
zosuquidar	1	ILE	340	6
zosuquidar	3	ILE	340	6
zosuquidar	4	ILE	340	6
zosuquidar	14	ILE	340	6
zosuquidar	18	ILE	340	6
zosuquidar	19	ILE	340	6
zosuquidar	20	ILE	340	6
342				
biricodar	1	ALA	342	6
biricodar	9	ALA	342	6
cisZ-flupenthixol	8	ALA	342	6
cisZ-flupenthixol	9	ALA	342	6
cisZ-flupenthixol	13	ALA	342	6
cisZ-flupenthixol	14	ALA	342	6
cisZ-flupenthixol	15	ALA	342	6
cisZ-flupenthixol	16	ALA	342	6
cyclosporinA	1	ALA	342	6
daunorubicin	9	ALA	342	6
daunorubicin	13	ALA	342	6
elacridar	0	ALA	342	6
elacridar	8	ALA	342	6
elacridar	13	ALA	342	6
elacridar	15	ALA	342	6
elacridar	16	ALA	342	6
hoechst33342	15	ALA	342	6
hoechst33342	16	ALA	342	6
ivermectin	9	ALA	342	6
ivermectin	11	ALA	342	6
ivermectin	12	ALA	342	6
ivermectin	16	ALA	342	6
lopinavir	2	ALA	342	6
lopinavir	8	ALA	342	6
paclitaxel	18	ALA	342	6
QZ59S_RRR	7	ALA	342	6
QZ59S_RRR	15	ALA	342	6
QZ59S_SSS	1	ALA	342	6
QZ59S_SSS	15	ALA	342	6

rhodamine123	9	ALA	342	6
rhodamine123	11	ALA	342	6
rhodamine123	12	ALA	342	6
ritonavir	1	ALA	342	6
ritonavir	14	ALA	342	6
ritonavir	16	ALA	342	6
saquinavir	16	ALA	342	6
tamoxifen	0	ALA	342	6
tamoxifen	11	ALA	342	6
tamoxifen	12	ALA	342	6
tamoxifen	16	ALA	342	6
tamoxifen	20	ALA	342	6
tariquidar	8	ALA	342	6
tariquidar	16	ALA	342	6
verapamil	1	ALA	342	6
verapamil	8	ALA	342	6
verapamil	12	ALA	342	6
vinblastine	5	ALA	342	6
zosuquidar	0	ALA	342	6
zosuquidar	13	ALA	342	6
343				
biricodar	0	PHE	343	6
biricodar	3	PHE	343	6
biricodar	4	PHE	343	6
biricodar	5	PHE	343	6
biricodar	6	PHE	343	6
biricodar	7	PHE	343	6
biricodar	9	PHE	343	6
biricodar	11	PHE	343	6
biricodar	16	PHE	343	6
biricodar	18	PHE	343	6
biricodar	23	PHE	343	6
cisZ-flupenthixol	2	PHE	343	6
cisZ-flupenthixol	8	PHE	343	6
cisZ-flupenthixol	9	PHE	343	6
cisZ-flupenthixol	13	PHE	343	6
cisZ-flupenthixol	14	PHE	343	6
cisZ-flupenthixol	15	PHE	343	6
cisZ-flupenthixol	16	PHE	343	6
cyclosporinA	0	PHE	343	6
cyclosporinA	1	PHE	343	6
cyclosporinA	2	PHE	343	6
cyclosporinA	3	PHE	343	6
cyclosporinA	4	PHE	343	6

cyclosporinA	5	PHE	343	6
cyclosporinA	7	PHE	343	6
cyclosporinA	10	PHE	343	6
cyclosporinA	12	PHE	343	6
cyclosporinA	13	PHE	343	6
cyclosporinA	14	PHE	343	6
cyclosporinA	15	PHE	343	6
cyclosporinA	16	PHE	343	6
cyclosporinA	17	PHE	343	6
cyclosporinA	19	PHE	343	6
cyclosporinA	22	PHE	343	6
cyclosporinA	23	PHE	343	6
cyclosporinA	24	PHE	343	6
daunorubicin	6	PHE	343	6
daunorubicin	9	PHE	343	6
daunorubicin	13	PHE	343	6
daunorubicin	20	PHE	343	6
daunorubicin	25	PHE	343	6
elacridar	0	PHE	343	6
elacridar	1	PHE	343	6
elacridar	2	PHE	343	6
elacridar	4	PHE	343	6
elacridar	5	PHE	343	6
elacridar	6	PHE	343	6
elacridar	8	PHE	343	6
elacridar	13	PHE	343	6
elacridar	15	PHE	343	6
elacridar	16	PHE	343	6
elacridar	17	PHE	343	6
elacridar	18	PHE	343	6
elacridar	20	PHE	343	6
elacridar	21	PHE	343	6
hoechst33342	4	PHE	343	6
hoechst33342	6	PHE	343	6
hoechst33342	15	PHE	343	6
hoechst33342	16	PHE	343	6
hoechst33342	22	PHE	343	6
ivermectin	0	PHE	343	6
ivermectin	2	PHE	343	6
ivermectin	3	PHE	343	6
ivermectin	4	PHE	343	6
ivermectin	5	PHE	343	6
ivermectin	6	PHE	343	6
ivermectin	7	PHE	343	6
ivermectin	9	PHE	343	6
ivermectin	10	PHE	343	6
ivermectin	11	PHE	343	6
ivermectin	12	PHE	343	6
ivermectin	13	PHE	343	6
ivermectin	14	PHE	343	6
ivermectin	15	PHE	343	6
ivermectin	16	PHE	343	6

ivermectin	17	PHE	343	6
ivermectin	18	PHE	343	6
ivermectin	19	PHE	343	6
ivermectin	20	PHE	343	6
ivermectin	21	PHE	343	6
ivermectin	23	PHE	343	6
lopinavir	1	PHE	343	6
lopinavir	2	PHE	343	6
lopinavir	3	PHE	343	6
lopinavir	4	PHE	343	6
lopinavir	7	PHE	343	6
lopinavir	8	PHE	343	6
lopinavir	10	PHE	343	6
lopinavir	11	PHE	343	6
lopinavir	14	PHE	343	6
lopinavir	15	PHE	343	6
lopinavir	16	PHE	343	6
lopinavir	18	PHE	343	6
lopinavir	22	PHE	343	6
paclitaxel	0	PHE	343	6
paclitaxel	1	PHE	343	6
paclitaxel	2	PHE	343	6
paclitaxel	3	PHE	343	6
paclitaxel	4	PHE	343	6
paclitaxel	5	PHE	343	6
paclitaxel	6	PHE	343	6
paclitaxel	7	PHE	343	6
paclitaxel	10	PHE	343	6
paclitaxel	14	PHE	343	6
paclitaxel	16	PHE	343	6
paclitaxel	18	PHE	343	6
paclitaxel	20	PHE	343	6
paclitaxel	23	PHE	343	6
QZ59S_RRR	0	PHE	343	6
QZ59S_RRR	1	PHE	343	6
QZ59S_RRR	2	PHE	343	6
QZ59S_RRR	3	PHE	343	6
QZ59S_RRR	5	PHE	343	6
QZ59S_RRR	6	PHE	343	6
QZ59S_RRR	7	PHE	343	6
QZ59S_RRR	11	PHE	343	6
QZ59S_RRR	14	PHE	343	6
QZ59S_RRR	15	PHE	343	6
QZ59S_RRR	19	PHE	343	6
QZ59S_RRR	21	PHE	343	6
QZ59S_SSS	0	PHE	343	6
QZ59S_SSS	1	PHE	343	6
QZ59S_SSS	4	PHE	343	6
QZ59S_SSS	5	PHE	343	6
QZ59S_SSS	12	PHE	343	6
QZ59S_SSS	14	PHE	343	6
QZ59S_SSS	15	PHE	343	6

QZ59S_SSS	16	PHE	343	6
QZ59S_SSS	17	PHE	343	6
QZ59S_SSS	22	PHE	343	6
rhodamine123	2	PHE	343	6
rhodamine123	9	PHE	343	6
rhodamine123	11	PHE	343	6
rhodamine123	12	PHE	343	6
rhodamine123	17	PHE	343	6
rhodamine123	18	PHE	343	6
rhodamine123	22	PHE	343	6
ritonavir	1	PHE	343	6
ritonavir	3	PHE	343	6
ritonavir	4	PHE	343	6
ritonavir	5	PHE	343	6
ritonavir	6	PHE	343	6
ritonavir	7	PHE	343	6
ritonavir	8	PHE	343	6
ritonavir	9	PHE	343	6
ritonavir	14	PHE	343	6
ritonavir	15	PHE	343	6
ritonavir	16	PHE	343	6
ritonavir	17	PHE	343	6
ritonavir	18	PHE	343	6
ritonavir	19	PHE	343	6
ritonavir	21	PHE	343	6
ritonavir	22	PHE	343	6
saquinavir	0	PHE	343	6
saquinavir	1	PHE	343	6
saquinavir	2	PHE	343	6
saquinavir	3	PHE	343	6
saquinavir	4	PHE	343	6
saquinavir	5	PHE	343	6
saquinavir	6	PHE	343	6
saquinavir	8	PHE	343	6
saquinavir	9	PHE	343	6
saquinavir	16	PHE	343	6
saquinavir	19	PHE	343	6
saquinavir	20	PHE	343	6
tamoxifen	0	PHE	343	6
tamoxifen	2	PHE	343	6
tamoxifen	8	PHE	343	6
tamoxifen	11	PHE	343	6
tamoxifen	12	PHE	343	6
tamoxifen	16	PHE	343	6
tamoxifen	20	PHE	343	6
tamoxifen	21	PHE	343	6
tamoxifen	22	PHE	343	6
tariquidar	0	PHE	343	6
tariquidar	1	PHE	343	6
tariquidar	2	PHE	343	6
tariquidar	3	PHE	343	6
tariquidar	4	PHE	343	6

tariquidar	6	PHE	343	6
tariquidar	8	PHE	343	6
tariquidar	13	PHE	343	6
tariquidar	16	PHE	343	6
tariquidar	21	PHE	343	6
tariquidar	22	PHE	343	6
valspodar	4	PHE	343	6
valspodar	5	PHE	343	6
valspodar	7	PHE	343	6
valspodar	8	PHE	343	6
valspodar	9	PHE	343	6
valspodar	10	PHE	343	6
valspodar	13	PHE	343	6
valspodar	14	PHE	343	6
valspodar	15	PHE	343	6
valspodar	16	PHE	343	6
valspodar	23	PHE	343	6
valspodar	25	PHE	343	6
verapamil	0	PHE	343	6
verapamil	1	PHE	343	6
verapamil	6	PHE	343	6
verapamil	8	PHE	343	6
verapamil	16	PHE	343	6
verapamil	18	PHE	343	6
vinblastine	1	PHE	343	6
vinblastine	2	PHE	343	6
vinblastine	3	PHE	343	6
vinblastine	4	PHE	343	6
vinblastine	5	PHE	343	6
vinblastine	6	PHE	343	6
vinblastine	11	PHE	343	6
vinblastine	12	PHE	343	6
vinblastine	13	PHE	343	6
vinblastine	14	PHE	343	6
vinblastine	16	PHE	343	6
vinblastine	24	PHE	343	6
zosuquidar	0	PHE	343	6
zosuquidar	1	PHE	343	6
zosuquidar	3	PHE	343	6
zosuquidar	4	PHE	343	6
zosuquidar	13	PHE	343	6
zosuquidar	20	PHE	343	6
zosuquidar	25	PHE	343	6
363				
pyrophosphate	25	TYR	363	CH6
721				
biricodar	8	ASN	721	7
biricodar	18	ASN	721	7
cisZ-flupenthixol	15	ASN	721	7

cisZ-flupenthixol	16	ASN	721	7
cyclosporinA	16	ASN	721	7
cyclosporinA	17	ASN	721	7
cyclosporinA	19	ASN	721	7
cyclosporinA	22	ASN	721	7
cyclosporinA	23	ASN	721	7
daunorubicin	20	ASN	721	7
doxorubicin	12	ASN	721	7
elacridar	4	ASN	721	7
elacridar	5	ASN	721	7
elacridar	16	ASN	721	7
elacridar	22	ASN	721	7
hoechst33342	15	ASN	721	7
ivermectin	15	ASN	721	7
ivermectin	23	ASN	721	7
lopinavir	16	ASN	721	7
lopinavir	17	ASN	721	7
paclitaxel	18	ASN	721	7
paclitaxel	20	ASN	721	7
paclitaxel	22	ASN	721	7
paclitaxel	23	ASN	721	7
QZ59S_RRR	3	ASN	721	7
QZ59S_RRR	15	ASN	721	7
QZ59S_RRR	21	ASN	721	7
QZ59S_SSS	4	ASN	721	7
QZ59S_SSS	14	ASN	721	7
QZ59S_SSS	15	ASN	721	7
QZ59S_SSS	16	ASN	721	7
QZ59S_SSS	17	ASN	721	7
QZ59S_SSS	22	ASN	721	7
rhodamine123	15	ASN	721	7
rhodamine123	16	ASN	721	7
rhodamine123	18	ASN	721	7
ritonavir	0	ASN	721	7
ritonavir	6	ASN	721	7
ritonavir	10	ASN	721	7
ritonavir	12	ASN	721	7
ritonavir	15	ASN	721	7
ritonavir	16	ASN	721	7
ritonavir	18	ASN	721	7
ritonavir	19	ASN	721	7
ritonavir	21	ASN	721	7
ritonavir	22	ASN	721	7
saquinavir	3	ASN	721	7
saquinavir	4	ASN	721	7
saquinavir	20	ASN	721	7
tamoxifen	16	ASN	721	7
tamoxifen	20	ASN	721	7
tariquidar	4	ASN	721	7
tariquidar	7	ASN	721	7
tariquidar	11	ASN	721	7

valspodar	15	ASN	721	7
valspodar	22	ASN	721	7
valspodar	23	ASN	721	7
verapamil	13	ASN	721	7
vinblastine	22	ASN	721	7
zosuquidar	13	ASN	721	7
724				
biricodar	8	LEU	724	7
biricodar	9	LEU	724	7
biricodar	12	LEU	724	7
biricodar	13	LEU	724	7
biricodar	18	LEU	724	7
cisZ-flupenthixol	15	LEU	724	7
cisZ-flupenthixol	16	LEU	724	7
daunorubicin	12	LEU	724	7
daunorubicin	15	LEU	724	7
daunorubicin	20	LEU	724	7
daunorubicin	22	LEU	724	7
doxorubicin	12	LEU	724	7
doxorubicin	15	LEU	724	7
doxorubicin	22	LEU	724	7
elacridar	4	LEU	724	7
elacridar	9	LEU	724	7
elacridar	13	LEU	724	7
elacridar	14	LEU	724	7
elacridar	20	LEU	724	7
hoechst33342	14	LEU	724	7
hoechst33342	15	LEU	724	7
hoechst33342	16	LEU	724	7
hoechst33342	22	LEU	724	7
ivermectin	15	LEU	724	7
ivermectin	23	LEU	724	7
lopinavir	12	LEU	724	7
lopinavir	14	LEU	724	7
paclitaxel	8	LEU	724	7
paclitaxel	23	LEU	724	7
QZ59S_RRR	3	LEU	724	7
QZ59S_RRR	10	LEU	724	7
QZ59S_RRR	11	LEU	724	7
QZ59S_RRR	12	LEU	724	7
QZ59S_RRR	13	LEU	724	7
QZ59S_RRR	20	LEU	724	7
QZ59S_RRR	21	LEU	724	7
QZ59S_SSS	11	LEU	724	7
QZ59S_SSS	14	LEU	724	7
QZ59S_SSS	22	LEU	724	7
rhodamine123	14	LEU	724	7
rhodamine123	15	LEU	724	7
rhodamine123	16	LEU	724	7

rhodamine123	18	LEU	724	7
rhodamine123	22	LEU	724	7
ritonavir	6	LEU	724	7
ritonavir	8	LEU	724	7
ritonavir	9	LEU	724	7
ritonavir	10	LEU	724	7
ritonavir	12	LEU	724	7
ritonavir	14	LEU	724	7
ritonavir	15	LEU	724	7
saquinavir	3	LEU	724	7
saquinavir	4	LEU	724	7
saquinavir	8	LEU	724	7
saquinavir	13	LEU	724	7
tamoxifen	13	LEU	724	7
tamoxifen	15	LEU	724	7
tamoxifen	16	LEU	724	7
tamoxifen	21	LEU	724	7
tamoxifen	22	LEU	724	7
tariquidar	11	LEU	724	7
tariquidar	12	LEU	724	7
tariquidar	13	LEU	724	7
tariquidar	16	LEU	724	7
tariquidar	21	LEU	724	7
valspodar	8	LEU	724	7
verapamil	8	LEU	724	7
verapamil	13	LEU	724	7
verapamil	21	LEU	724	7
vinblastine	12	LEU	724	7
zosuquidar	10	LEU	724	7
zosuquidar	22	LEU	724	7
758				
biricodar	12	LEU	758	8
doxorubicin	12	LEU	758	8
elacridar	12	LEU	758	8
hoechst33342	11	LEU	758	8
lopinavir	12	LEU	758	8
QZ59S_RRR	10	LEU	758	8
QZ59S_RRR	11	LEU	758	8
QZ59S_SSS	11	LEU	758	8
QZ59S_SSS	12	LEU	758	8
tariquidar	12	LEU	758	8
verapamil	12	LEU	758	8
vinblastine	12	LEU	758	8
zosuquidar	11	LEU	758	8
zosuquidar	12	LEU	758	8
760				
hoechst33342	13	LEU	760	8
hoechst33342	14	LEU	760	8
rhodamine123	15	LEU	760	8
rhodamine123	16	LEU	760	8

764				
hoechst33342	14	ILE	764	8
768				
cyclosporinA	17	ILE	768	8
lopinavir	17	ILE	768	8
lopinavir	18	ILE	768	8
paclitaxel	19	ILE	768	8
paclitaxel	20	ILE	768	8
ritonavir	10	ILE	768	8
ritonavir	19	ILE	768	8
ritonavir	21	ILE	768	8
saquinavir	16	ILE	768	8
valspodar	15	ILE	768	8
zosuquidar	25	ILE	768	8
833				
ADP	16	LEU	833	CH9
daunorubicin	4	LEU	833	CH9
lopinavir	5	LEU	833	CH9
QZ59S_RRR	4	LEU	833	CH9
QZ59S_SSS	3	LEU	833	CH9
tariquidar	3	LEU	833	CH9
tariquidar	5	LEU	833	CH9
841				
QZ59S_RRR	3	ALA	841	9
QZ59S_SSS	4	ALA	841	9
ritonavir	10	ALA	841	9
tamoxifen	4	ALA	841	9
tariquidar	4	ALA	841	9
tariquidar	7	ALA	841	9
864				
rhodamine123	25	ILE	864	10
868				
rhodamine123	25	ILE	868	10
ritonavir	17	ILE	868	10
verapamil	17	ILE	868	10
872				
ADP	19	GLY	872	10
ADP	20	GLY	872	10
rhodamine123	25	GLY	872	10
tariquidar	2	GLY	872	10
938				
ADP	8	PHE	938	11
ADP	9	PHE	938	11
ADP	14	PHE	938	11

biricodar	14	PHE	938	11
biricodar	15	PHE	938	11
biricodar	17	PHE	938	11
biricodar	20	PHE	938	11
biricodar	25	PHE	938	11
cisZ-flupenthixol	3	PHE	938	11
cisZ-flupenthixol	18	PHE	938	11
cyclosporinA	9	PHE	938	11
cyclosporinA	10	PHE	938	11
cyclosporinA	12	PHE	938	11
cyclosporinA	13	PHE	938	11
daunorubicin	0	PHE	938	11
daunorubicin	23	PHE	938	11
daunorubicin	24	PHE	938	11
doxorubicin	6	PHE	938	11
doxorubicin	17	PHE	938	11
doxorubicin	20	PHE	938	11
doxorubicin	21	PHE	938	11
doxorubicin	23	PHE	938	11
doxorubicin	24	PHE	938	11
elacridar	11	PHE	938	11
elacridar	17	PHE	938	11
elacridar	18	PHE	938	11
elacridar	24	PHE	938	11
hoechst33342	10	PHE	938	11
hoechst33342	24	PHE	938	11
ivermectin	8	PHE	938	11
ivermectin	13	PHE	938	11
ivermectin	22	PHE	938	11
ivermectin	25	PHE	938	11
lopinavir	9	PHE	938	11
lopinavir	11	PHE	938	11
lopinavir	15	PHE	938	11
lopinavir	19	PHE	938	11
lopinavir	20	PHE	938	11
lopinavir	24	PHE	938	11
lopinavir	25	PHE	938	11
paclitaxel	13	PHE	938	11
paclitaxel	14	PHE	938	11
paclitaxel	16	PHE	938	11
QZ59S_SSS	10	PHE	938	11
QZ59S_SSS	18	PHE	938	11
QZ59S_SSS	24	PHE	938	11
QZ59S_SSS	25	PHE	938	11
rhodamine123	0	PHE	938	11
rhodamine123	20	PHE	938	11
ritonavir	3	PHE	938	11
ritonavir	7	PHE	938	11
ritonavir	13	PHE	938	11
ritonavir	20	PHE	938	11

ritonavir	23	PHE	938	11
ritonavir	24	PHE	938	11
ritonavir	25	PHE	938	11
saquinavir	9	PHE	938	11
saquinavir	11	PHE	938	11
saquinavir	12	PHE	938	11
saquinavir	14	PHE	938	11
saquinavir	15	PHE	938	11
saquinavir	19	PHE	938	11
saquinavir	24	PHE	938	11
tamoxifen	6	PHE	938	11
tamoxifen	14	PHE	938	11
tamoxifen	17	PHE	938	11
tamoxifen	18	PHE	938	11
tamoxifen	25	PHE	938	11
tariquidar	2	PHE	938	11
tariquidar	14	PHE	938	11
tariquidar	15	PHE	938	11
tariquidar	17	PHE	938	11
tariquidar	19	PHE	938	11
tariquidar	20	PHE	938	11
tariquidar	23	PHE	938	11
tariquidar	24	PHE	938	11
tariquidar	25	PHE	938	11
valspodar	9	PHE	938	11
valspodar	11	PHE	938	11
valspodar	13	PHE	938	11
valspodar	14	PHE	938	11
valspodar	16	PHE	938	11
valspodar	18	PHE	938	11
verapamil	11	PHE	938	11
verapamil	15	PHE	938	11
verapamil	17	PHE	938	11
verapamil	19	PHE	938	11
verapamil	25	PHE	938	11
vinblastine	8	PHE	938	11
vinblastine	11	PHE	938	11
vinblastine	15	PHE	938	11
vinblastine	16	PHE	938	11
vinblastine	17	PHE	938	11
vinblastine	18	PHE	938	11
vinblastine	19	PHE	938	11
vinblastine	20	PHE	938	11
vinblastine	21	PHE	938	11
zosuquidar	2	PHE	938	11
zosuquidar	5	PHE	938	11
zosuquidar	6	PHE	938	11
zosuquidar	14	PHE	938	11
941				
daunorubicin	21	THR	941	11
doxorubicin	21	THR	941	11

hoechst33342	10	THR	941	11
lopinavir	0	THR	941	11
ritonavir	13	THR	941	11
verapamil	11	THR	941	11
verapamil	17	THR	941	11
942				
biricodar	2	PHE	942	11
biricodar	14	PHE	942	11
biricodar	16	PHE	942	11
biricodar	17	PHE	942	11
biricodar	19	PHE	942	11
biricodar	20	PHE	942	11
biricodar	24	PHE	942	11
biricodar	25	PHE	942	11
cisZ-flupenthixol	18	PHE	942	11
cisZ-flupenthixol	19	PHE	942	11
cisZ-flupenthixol	25	PHE	942	11
cyclosporinA	4	PHE	942	11
cyclosporinA	7	PHE	942	11
cyclosporinA	9	PHE	942	11
cyclosporinA	10	PHE	942	11
cyclosporinA	13	PHE	942	11
cyclosporinA	14	PHE	942	11
cyclosporinA	15	PHE	942	11
cyclosporinA	22	PHE	942	11
cyclosporinA	23	PHE	942	11
cyclosporinA	24	PHE	942	11
cyclosporinA	25	PHE	942	11
daunorubicin	0	PHE	942	11
daunorubicin	21	PHE	942	11
daunorubicin	24	PHE	942	11
doxorubicin	17	PHE	942	11
doxorubicin	18	PHE	942	11
doxorubicin	21	PHE	942	11
doxorubicin	23	PHE	942	11
doxorubicin	24	PHE	942	11
elacridar	3	PHE	942	11
elacridar	7	PHE	942	11
elacridar	10	PHE	942	11
elacridar	11	PHE	942	11
elacridar	17	PHE	942	11
elacridar	18	PHE	942	11
elacridar	19	PHE	942	11
elacridar	20	PHE	942	11
elacridar	23	PHE	942	11
elacridar	24	PHE	942	11
hoechst33342	0	PHE	942	11
hoechst33342	8	PHE	942	11

hoechst33342	12	PHE	942	11
hoechst33342	23	PHE	942	11
hoechst33342	24	PHE	942	11
hoechst33342	25	PHE	942	11
ivermectin	8	PHE	942	11
ivermectin	13	PHE	942	11
ivermectin	20	PHE	942	11
ivermectin	22	PHE	942	11
ivermectin	24	PHE	942	11
ivermectin	25	PHE	942	11
lopinavir	9	PHE	942	11
lopinavir	11	PHE	942	11
lopinavir	15	PHE	942	11
lopinavir	19	PHE	942	11
lopinavir	20	PHE	942	11
lopinavir	23	PHE	942	11
paclitaxel	7	PHE	942	11
paclitaxel	10	PHE	942	11
paclitaxel	13	PHE	942	11
paclitaxel	16	PHE	942	11
paclitaxel	21	PHE	942	11
paclitaxel	24	PHE	942	11
paclitaxel	25	PHE	942	11
QZ59S_RRR	18	PHE	942	11
QZ59S_RRR	22	PHE	942	11
QZ59S_RRR	23	PHE	942	11
QZ59S_RRR	24	PHE	942	11
QZ59S_RRR	25	PHE	942	11
QZ59S_SSS	7	PHE	942	11
QZ59S_SSS	18	PHE	942	11
QZ59S_SSS	19	PHE	942	11
QZ59S_SSS	20	PHE	942	11
QZ59S_SSS	21	PHE	942	11
rhodamine123	19	PHE	942	11
ritonavir	3	PHE	942	11
ritonavir	13	PHE	942	11
ritonavir	17	PHE	942	11
ritonavir	20	PHE	942	11
ritonavir	23	PHE	942	11
ritonavir	24	PHE	942	11
ritonavir	25	PHE	942	11
saquinavir	6	PHE	942	11
saquinavir	7	PHE	942	11
saquinavir	10	PHE	942	11
saquinavir	12	PHE	942	11
saquinavir	14	PHE	942	11
saquinavir	17	PHE	942	11
saquinavir	18	PHE	942	11
saquinavir	19	PHE	942	11
saquinavir	21	PHE	942	11
saquinavir	24	PHE	942	11
saquinavir	25	PHE	942	11

tamoxifen	14	PHE	942	11
tamoxifen	17	PHE	942	11
tamoxifen	18	PHE	942	11
tamoxifen	19	PHE	942	11
tariquidar	2	PHE	942	11
tariquidar	15	PHE	942	11
tariquidar	17	PHE	942	11
tariquidar	19	PHE	942	11
tariquidar	20	PHE	942	11
tariquidar	21	PHE	942	11
tariquidar	24	PHE	942	11
tariquidar	25	PHE	942	11
valspodar	7	PHE	942	11
valspodar	9	PHE	942	11
valspodar	11	PHE	942	11
valspodar	13	PHE	942	11
valspodar	14	PHE	942	11
valspodar	16	PHE	942	11
valspodar	18	PHE	942	11
valspodar	23	PHE	942	11
valspodar	24	PHE	942	11
verapamil	11	PHE	942	11
verapamil	15	PHE	942	11
verapamil	17	PHE	942	11
verapamil	19	PHE	942	11
verapamil	23	PHE	942	11
vinblastine	2	PHE	942	11
vinblastine	8	PHE	942	11
vinblastine	9	PHE	942	11
vinblastine	10	PHE	942	11
vinblastine	13	PHE	942	11
vinblastine	14	PHE	942	11
vinblastine	16	PHE	942	11
vinblastine	19	PHE	942	11
vinblastine	20	PHE	942	11
vinblastine	22	PHE	942	11
vinblastine	25	PHE	942	11
zosuquidar	17	PHE	942	11
zosuquidar	18	PHE	942	11
zosuquidar	19	PHE	942	11
zosuquidar	20	PHE	942	11
945				
daunorubicin	21	THR	945	11
hoechst33342	10	THR	945	11
lopinavir	0	THR	945	11
ritonavir	3	THR	945	11
ritonavir	13	THR	945	11
ritonavir	17	THR	945	11
saquinavir	10	THR	945	11
saquinavir	14	THR	945	11
saquinavir	21	THR	945	11

verapamil	17	THR	945	11
vinblastine	0	THR	945	11
vinblastine	2	THR	945	11
946				
biricodar	0	GLN	946	11
biricodar	2	GLN	946	11
biricodar	6	GLN	946	11
biricodar	10	GLN	946	11
biricodar	11	GLN	946	11
biricodar	13	GLN	946	11
biricodar	19	GLN	946	11
biricodar	20	GLN	946	11
biricodar	24	GLN	946	11
cisZ-flupenthixol	19	GLN	946	11
cyclosporinA	4	GLN	946	11
cyclosporinA	7	GLN	946	11
cyclosporinA	9	GLN	946	11
cyclosporinA	13	GLN	946	11
cyclosporinA	22	GLN	946	11
cyclosporinA	24	GLN	946	11
cyclosporinA	25	GLN	946	11
daunorubicin	0	GLN	946	11
daunorubicin	18	GLN	946	11
daunorubicin	21	GLN	946	11
doxorubicin	18	GLN	946	11
elacridar	3	GLN	946	11
elacridar	7	GLN	946	11
elacridar	19	GLN	946	11
elacridar	20	GLN	946	11
hoechst33342	0	GLN	946	11
hoechst33342	8	GLN	946	11
hoechst33342	9	GLN	946	11
hoechst33342	12	GLN	946	11
hoechst33342	18	GLN	946	11
hoechst33342	23	GLN	946	11
ivermectin	22	GLN	946	11
ivermectin	24	GLN	946	11
lopinavir	20	GLN	946	11
lopinavir	23	GLN	946	11
paclitaxel	7	GLN	946	11
paclitaxel	10	GLN	946	11
paclitaxel	21	GLN	946	11
QZ59S_RRR	14	GLN	946	11
QZ59S_RRR	18	GLN	946	11
QZ59S_RRR	23	GLN	946	11
QZ59S_RRR	24	GLN	946	11
QZ59S_RRR	25	GLN	946	11
QZ59S_SSS	2	GLN	946	11
QZ59S_SSS	7	GLN	946	11
QZ59S_SSS	19	GLN	946	11

QZ59S_SSS	20	GLN	946	11
QZ59S_SSS	21	GLN	946	11
QZ59S_SSS	22	GLN	946	11
QZ59S_SSS	23	GLN	946	11
rhodamine123	19	GLN	946	11
ritonavir	3	GLN	946	11
ritonavir	4	GLN	946	11
ritonavir	17	GLN	946	11
ritonavir	23	GLN	946	11
saquinavir	0	GLN	946	11
saquinavir	6	GLN	946	11
saquinavir	7	GLN	946	11
saquinavir	10	GLN	946	11
saquinavir	14	GLN	946	11
saquinavir	18	GLN	946	11
saquinavir	21	GLN	946	11
tamoxifen	14	GLN	946	11
tamoxifen	19	GLN	946	11
tamoxifen	21	GLN	946	11
tamoxifen	23	GLN	946	11
tariquidar	10	GLN	946	11
tariquidar	17	GLN	946	11
tariquidar	21	GLN	946	11
valspodar	24	GLN	946	11
verapamil	10	GLN	946	11
verapamil	23	GLN	946	11
vinblastine	2	GLN	946	11
vinblastine	6	GLN	946	11
vinblastine	7	GLN	946	11
vinblastine	8	GLN	946	11
zosuquidar	17	GLN	946	11
zosuquidar	19	GLN	946	11
zosuquidar	20	GLN	946	11
949				
biricodar	0	MET	949	11
biricodar	6	MET	949	11
biricodar	13	MET	949	11
biricodar	19	MET	949	11
biricodar	20	MET	949	11
cisZ-flupenthixol	19	MET	949	11
cyclosporinA	7	MET	949	11
cyclosporinA	22	MET	949	11
daunorubicin	18	MET	949	11
doxorubicin	1	MET	949	11
doxorubicin	18	MET	949	11
elacridar	3	MET	949	11
elacridar	17	MET	949	11
elacridar	20	MET	949	11
hoechst33342	0	MET	949	11
hoechst33342	8	MET	949	11

hoechst33342	9	MET	949	11
ivermectin	0	MET	949	11
ivermectin	1	MET	949	11
ivermectin	6	MET	949	11
ivermectin	22	MET	949	11
lopinavir	20	MET	949	11
QZ59S_RRR	0	MET	949	11
QZ59S_RRR	21	MET	949	11
QZ59S_SSS	2	MET	949	11
QZ59S_SSS	21	MET	949	11
QZ59S_SSS	22	MET	949	11
rhodamine123	19	MET	949	11
rhodamine123	22	MET	949	11
rhodamine123	25	MET	949	11
ritonavir	1	MET	949	11
ritonavir	3	MET	949	11
ritonavir	4	MET	949	11
ritonavir	11	MET	949	11
saquinavir	0	MET	949	11
saquinavir	4	MET	949	11
saquinavir	10	MET	949	11
saquinavir	13	MET	949	11
tamoxifen	19	MET	949	11
tariquidar	0	MET	949	11
tariquidar	10	MET	949	11
verapamil	10	MET	949	11
vinblastine	1	MET	949	11
vinblastine	2	MET	949	11
vinblastine	6	MET	949	11
vinblastine	7	MET	949	11
zosuquidar	20	MET	949	11
971				
cisZ-flupenthixol	5	PHE	971	EL11-12
cisZ-flupenthixol	23	PHE	971	EL11-12
daunorubicin	7	PHE	971	EL11-12
daunorubicin	8	PHE	971	EL11-12
daunorubicin	14	PHE	971	EL11-12
daunorubicin	16	PHE	971	EL11-12
doxorubicin	8	PHE	971	EL11-12
doxorubicin	14	PHE	971	EL11-12
hoechst33342	2	PHE	971	EL11-12
hoechst33342	6	PHE	971	EL11-12
hoechst33342	12	PHE	971	EL11-12
QZ59S_RRR	16	PHE	971	EL11-12
QZ59S_RRR	17	PHE	971	EL11-12
QZ59S_SSS	8	PHE	971	EL11-12
QZ59S_SSS	9	PHE	971	EL11-12
rhodamine123	6	PHE	971	EL11-12
rhodamine123	7	PHE	971	EL11-12

rhodamine123	8	PHE	971	EL11-12
ritonavir	11	PHE	971	EL11-12
verapamil	9	PHE	971	EL11-12
zosuquidar	16	PHE	971	EL11-12
zosuquidar	21	PHE	971	EL11-12
974				
cisZ-flupenthixol	23	VAL	974	EH12
daunorubicin	14	VAL	974	EH12
doxorubicin	14	VAL	974	EH12
QZ59S_RRR	16	VAL	974	EH12
QZ59S_RRR	17	VAL	974	EH12
975				
biricodar	5	LEU	975	EH12
biricodar	7	LEU	975	EH12
biricodar	13	LEU	975	EH12
cisZ-flupenthixol	0	LEU	975	EH12
cisZ-flupenthixol	1	LEU	975	EH12
cisZ-flupenthixol	2	LEU	975	EH12
cisZ-flupenthixol	4	LEU	975	EH12
cisZ-flupenthixol	5	LEU	975	EH12
cisZ-flupenthixol	6	LEU	975	EH12
cisZ-flupenthixol	7	LEU	975	EH12
cisZ-flupenthixol	10	LEU	975	EH12
cisZ-flupenthixol	17	LEU	975	EH12
cisZ-flupenthixol	20	LEU	975	EH12
cisZ-flupenthixol	21	LEU	975	EH12
cisZ-flupenthixol	23	LEU	975	EH12
cisZ-flupenthixol	24	LEU	975	EH12
daunorubicin	1	LEU	975	EH12
daunorubicin	3	LEU	975	EH12
daunorubicin	5	LEU	975	EH12
daunorubicin	6	LEU	975	EH12
daunorubicin	7	LEU	975	EH12
daunorubicin	10	LEU	975	EH12
daunorubicin	14	LEU	975	EH12
daunorubicin	15	LEU	975	EH12

daunorubicin	16	LEU	975	EH12
daunorubicin	17	LEU	975	EH12
daunorubicin	22	LEU	975	EH12
doxorubicin	5	LEU	975	EH12
doxorubicin	7	LEU	975	EH12
doxorubicin	8	LEU	975	EH12
doxorubicin	9	LEU	975	EH12
doxorubicin	10	LEU	975	EH12
doxorubicin	13	LEU	975	EH12
doxorubicin	14	LEU	975	EH12
doxorubicin	15	LEU	975	EH12
doxorubicin	16	LEU	975	EH12
elacridar	3	LEU	975	EH12
elacridar	5	LEU	975	EH12
elacridar	6	LEU	975	EH12
elacridar	7	LEU	975	EH12
elacridar	9	LEU	975	EH12
elacridar	21	LEU	975	EH12
hoechst33342	2	LEU	975	EH12
hoechst33342	4	LEU	975	EH12
hoechst33342	5	LEU	975	EH12
hoechst33342	6	LEU	975	EH12
hoechst33342	7	LEU	975	EH12
hoechst33342	12	LEU	975	EH12
hoechst33342	17	LEU	975	EH12
ivermectin	1	LEU	975	EH12
ivermectin	5	LEU	975	EH12
ivermectin	6	LEU	975	EH12
lopinavir	13	LEU	975	EH12
QZ59S_RRR	2	LEU	975	EH12
QZ59S_RRR	5	LEU	975	EH12
QZ59S_RRR	9	LEU	975	EH12
QZ59S_RRR	16	LEU	975	EH12
QZ59S_RRR	17	LEU	975	EH12
QZ59S_RRR	20	LEU	975	EH12
QZ59S_SSS	5	LEU	975	EH12
QZ59S_SSS	8	LEU	975	EH12
QZ59S_SSS	9	LEU	975	EH12
rhodamine123	1	LEU	975	EH12
rhodamine123	3	LEU	975	EH12
rhodamine123	4	LEU	975	EH12
rhodamine123	5	LEU	975	EH12
rhodamine123	6	LEU	975	EH12
rhodamine123	7	LEU	975	EH12
rhodamine123	8	LEU	975	EH12
rhodamine123	10	LEU	975	EH12
rhodamine123	21	LEU	975	EH12
ritonavir	11	LEU	975	EH12
tamoxifen	1	LEU	975	EH12
tamoxifen	2	LEU	975	EH12
tamoxifen	3	LEU	975	EH12
tamoxifen	5	LEU	975	EH12

tamoxifen	7	LEU	975	EH12
tamoxifen	9	LEU	975	EH12
tamoxifen	10	LEU	975	EH12
tamoxifen	13	LEU	975	EH12
tamoxifen	15	LEU	975	EH12
tamoxifen	22	LEU	975	EH12
tariquidar	0	LEU	975	EH12
tariquidar	6	LEU	975	EH12
tariquidar	7	LEU	975	EH12
tariquidar	9	LEU	975	EH12
tariquidar	12	LEU	975	EH12
tariquidar	13	LEU	975	EH12
verapamil	3	LEU	975	EH12
verapamil	4	LEU	975	EH12
verapamil	5	LEU	975	EH12
verapamil	7	LEU	975	EH12
verapamil	9	LEU	975	EH12
verapamil	10	LEU	975	EH12
verapamil	14	LEU	975	EH12
verapamil	21	LEU	975	EH12
zosuquidar	1	LEU	975	EH12
zosuquidar	3	LEU	975	EH12
zosuquidar	9	LEU	975	EH12
zosuquidar	16	LEU	975	EH12
zosuquidar	21	LEU	975	EH12
zosuquidar	22	LEU	975	EH12
978				
biricodar	0	PHE	978	12
biricodar	2	PHE	978	12
biricodar	5	PHE	978	12
biricodar	6	PHE	978	12
biricodar	7	PHE	978	12
biricodar	10	PHE	978	12
cisZ-flupenthixol	0	PHE	978	12
cisZ-flupenthixol	1	PHE	978	12
cisZ-flupenthixol	2	PHE	978	12
cisZ-flupenthixol	4	PHE	978	12
cisZ-flupenthixol	6	PHE	978	12
cisZ-flupenthixol	7	PHE	978	12
cisZ-flupenthixol	10	PHE	978	12
cisZ-flupenthixol	22	PHE	978	12
cisZ-flupenthixol	23	PHE	978	12

cisZ-flupenthixol	24	PHE	978	12
daunorubicin	1	PHE	978	12
daunorubicin	2	PHE	978	12
daunorubicin	3	PHE	978	12
daunorubicin	5	PHE	978	12
daunorubicin	6	PHE	978	12
daunorubicin	10	PHE	978	12
daunorubicin	22	PHE	978	12
doxorubicin	2	PHE	978	12
doxorubicin	3	PHE	978	12
doxorubicin	5	PHE	978	12
doxorubicin	7	PHE	978	12
doxorubicin	9	PHE	978	12
doxorubicin	10	PHE	978	12
doxorubicin	22	PHE	978	12
elacridar	1	PHE	978	12
elacridar	2	PHE	978	12
elacridar	3	PHE	978	12
elacridar	4	PHE	978	12
elacridar	6	PHE	978	12
elacridar	7	PHE	978	12
elacridar	9	PHE	978	12
elacridar	10	PHE	978	12
hoechst33342	2	PHE	978	12
hoechst33342	8	PHE	978	12
hoechst33342	9	PHE	978	12
hoechst33342	22	PHE	978	12
hoechst33342	23	PHE	978	12
hoechst33342	25	PHE	978	12
ivermectin	0	PHE	978	12
ivermectin	1	PHE	978	12
ivermectin	3	PHE	978	12
ivermectin	5	PHE	978	12
ivermectin	6	PHE	978	12
lopinavir	10	PHE	978	12
paclitaxel	7	PHE	978	12
paclitaxel	8	PHE	978	12
QZ59S_RRR	0	PHE	978	12
QZ59S_RRR	1	PHE	978	12
QZ59S_RRR	2	PHE	978	12
QZ59S_RRR	6	PHE	978	12
QZ59S_RRR	9	PHE	978	12
QZ59S_SSS	2	PHE	978	12
QZ59S_SSS	5	PHE	978	12
QZ59S_SSS	6	PHE	978	12
rhodamine123	1	PHE	978	12
rhodamine123	3	PHE	978	12
rhodamine123	4	PHE	978	12
rhodamine123	5	PHE	978	12
rhodamine123	6	PHE	978	12
rhodamine123	7	PHE	978	12

rhodamine123	10	PHE	978	12
rhodamine123	22	PHE	978	12
rhodamine123	23	PHE	978	12
ritonavir	4	PHE	978	12
saquinavir	10	PHE	978	12
tamoxifen	1	PHE	978	12
tamoxifen	2	PHE	978	12
tamoxifen	3	PHE	978	12
tamoxifen	5	PHE	978	12
tamoxifen	7	PHE	978	12
tamoxifen	9	PHE	978	12
tamoxifen	10	PHE	978	12
tamoxifen	22	PHE	978	12
tamoxifen	23	PHE	978	12
tariquidar	0	PHE	978	12
tariquidar	6	PHE	978	12
tariquidar	7	PHE	978	12
tariquidar	9	PHE	978	12
tariquidar	10	PHE	978	12
verapamil	3	PHE	978	12
verapamil	4	PHE	978	12
verapamil	5	PHE	978	12
verapamil	6	PHE	978	12
verapamil	7	PHE	978	12
verapamil	9	PHE	978	12
verapamil	10	PHE	978	12
verapamil	21	PHE	978	12
verapamil	22	PHE	978	12
verapamil	23	PHE	978	12
vinblastine	6	PHE	978	12
vinblastine	7	PHE	978	12
vinblastine	9	PHE	978	12
vinblastine	10	PHE	978	12
vinblastine	24	PHE	978	12
zosuquidar	3	PHE	978	12
zosuquidar	4	PHE	978	12
zosuquidar	9	PHE	978	12
zosuquidar	22	PHE	978	12
980				
981				
doxorubicin	2	VAL	981	12
doxorubicin	22	VAL	981	12
hoechst33342	23	VAL	981	12
QZ59S_RRR	0	VAL	981	12
QZ59S_SSS	2	VAL	981	12
rhodamine123	22	VAL	981	12
rhodamine123	23	VAL	981	12
saquinavir	23	VAL	981	12
tamoxifen	22	VAL	981	12
verapamil	22	VAL	981	12

verapamil	23	VAL	981	12
zosuquidar	22	VAL	981	12
982				
biricodar	0	VAL	982	12
biricodar	2	VAL	982	12
biricodar	5	VAL	982	12
biricodar	10	VAL	982	12
biricodar	13	VAL	982	12
biricodar	19	VAL	982	12
biricodar	20	VAL	982	12
cisZ- flupenthixol	0	VAL	982	12
cisZ- flupenthixol	1	VAL	982	12
cisZ- flupenthixol	6	VAL	982	12
cisZ- flupenthixol	24	VAL	982	12
cyclosporinA	7	VAL	982	12
cyclosporinA	13	VAL	982	12
daunorubicin	1	VAL	982	12
daunorubicin	2	VAL	982	12
daunorubicin	3	VAL	982	12
daunorubicin	5	VAL	982	12
daunorubicin	18	VAL	982	12
doxorubicin	2	VAL	982	12
doxorubicin	3	VAL	982	12
doxorubicin	7	VAL	982	12
doxorubicin	18	VAL	982	12
doxorubicin	22	VAL	982	12
elacridar	2	VAL	982	12
elacridar	6	VAL	982	12
elacridar	17	VAL	982	12
elacridar	21	VAL	982	12
hoechst33342	2	VAL	982	12
hoechst33342	9	VAL	982	12
hoechst33342	18	VAL	982	12
hoechst33342	23	VAL	982	12
hoechst33342	25	VAL	982	12
ivermectin	0	VAL	982	12
ivermectin	1	VAL	982	12
ivermectin	3	VAL	982	12
ivermectin	19	VAL	982	12
ivermectin	20	VAL	982	12
ivermectin	21	VAL	982	12
ivermectin	23	VAL	982	12
lopinavir	3	VAL	982	12
paclitaxel	10	VAL	982	12
QZ59S_RRR	1	VAL	982	12
QZ59S_RRR	6	VAL	982	12
QZ59S_RRR	14	VAL	982	12

QZ59S_RRR	21	VAL	982	12
QZ59S_SSS	0	VAL	982	12
QZ59S_SSS	2	VAL	982	12
QZ59S_SSS	4	VAL	982	12
QZ59S_SSS	5	VAL	982	12
QZ59S_SSS	6	VAL	982	12
QZ59S_SSS	21	VAL	982	12
QZ59S_SSS	22	VAL	982	12
rhodamine123	1	VAL	982	12
rhodamine123	21	VAL	982	12
rhodamine123	22	VAL	982	12
rhodamine123	23	VAL	982	12
ritonavir	4	VAL	982	12
ritonavir	12	VAL	982	12
saquinavir	3	VAL	982	12
saquinavir	4	VAL	982	12
saquinavir	10	VAL	982	12
saquinavir	14	VAL	982	12
saquinavir	18	VAL	982	12
saquinavir	23	VAL	982	12
tamoxifen	1	VAL	982	12
tamoxifen	2	VAL	982	12
tamoxifen	3	VAL	982	12
tamoxifen	19	VAL	982	12
tamoxifen	21	VAL	982	12
tamoxifen	22	VAL	982	12
tamoxifen	23	VAL	982	12
tariquidar	0	VAL	982	12
tariquidar	4	VAL	982	12
tariquidar	6	VAL	982	12
tariquidar	7	VAL	982	12
tariquidar	10	VAL	982	12
tariquidar	17	VAL	982	12
tariquidar	21	VAL	982	12
valspodar	5	VAL	982	12
valspodar	7	VAL	982	12
valspodar	8	VAL	982	12
verapamil	2	VAL	982	12
verapamil	4	VAL	982	12
verapamil	10	VAL	982	12
verapamil	16	VAL	982	12
verapamil	18	VAL	982	12
verapamil	21	VAL	982	12
verapamil	22	VAL	982	12
verapamil	23	VAL	982	12
vinblastine	2	VAL	982	12
vinblastine	6	VAL	982	12
vinblastine	9	VAL	982	12
vinblastine	10	VAL	982	12
vinblastine	24	VAL	982	12
zosuquidar	1	VAL	982	12
zosuquidar	3	VAL	982	12

zosuquidar	20	VAL	982	12
zosuquidar	22	VAL	982	12
984				
vinblastine	2	GLY	984	12
985				
biricodar	0	ALA	985	12
biricodar	2	ALA	985	12
biricodar	19	ALA	985	12
cyclosporinA	3	ALA	985	12
cyclosporinA	4	ALA	985	12
cyclosporinA	13	ALA	985	12
cyclosporinA	22	ALA	985	12
daunorubicin	18	ALA	985	12
daunorubicin	21	ALA	985	12
doxorubicin	1	ALA	985	12
doxorubicin	18	ALA	985	12
hoechst33342	10	ALA	985	12
hoechst33342	23	ALA	985	12
hoechst33342	25	ALA	985	12
ivermectin	4	ALA	985	12
ivermectin	13	ALA	985	12
lopinavir	1	ALA	985	12
QZ59S_RRR	0	ALA	985	12
QZ59S_RRR	21	ALA	985	12
QZ59S_SSS	0	ALA	985	12
QZ59S_SSS	2	ALA	985	12
QZ59S_SSS	21	ALA	985	12
QZ59S_SSS	22	ALA	985	12
rhodamine123	23	ALA	985	12
ritonavir	0	ALA	985	12
ritonavir	1	ALA	985	12
ritonavir	3	ALA	985	12
ritonavir	4	ALA	985	12
ritonavir	17	ALA	985	12
ritonavir	22	ALA	985	12
ritonavir	23	ALA	985	12
saquinavir	0	ALA	985	12
saquinavir	2	ALA	985	12
saquinavir	11	ALA	985	12
saquinavir	14	ALA	985	12
saquinavir	17	ALA	985	12
saquinavir	18	ALA	985	12
saquinavir	19	ALA	985	12
saquinavir	23	ALA	985	12
tamoxifen	23	ALA	985	12
tariquidar	17	ALA	985	12
tariquidar	21	ALA	985	12
valspodar	3	ALA	985	12
valspodar	5	ALA	985	12
valspodar	13	ALA	985	12

verapamil	23	ALA	985	12
vinblastine	2	ALA	985	12
vinblastine	22	ALA	985	12
986				
biricodar	0	MET	986	12
biricodar	2	MET	986	12
biricodar	3	MET	986	12
biricodar	13	MET	986	12
biricodar	18	MET	986	12
biricodar	19	MET	986	12
biricodar	23	MET	986	12
biricodar	24	MET	986	12
cyclosporinA	3	MET	986	12
cyclosporinA	5	MET	986	12
cyclosporinA	7	MET	986	12
cyclosporinA	9	MET	986	12
cyclosporinA	12	MET	986	12
cyclosporinA	13	MET	986	12
cyclosporinA	14	MET	986	12
cyclosporinA	15	MET	986	12
cyclosporinA	17	MET	986	12
cyclosporinA	19	MET	986	12
cyclosporinA	22	MET	986	12
cyclosporinA	23	MET	986	12
cyclosporinA	24	MET	986	12
cyclosporinA	25	MET	986	12
daunorubicin	4	MET	986	12
daunorubicin	18	MET	986	12
daunorubicin	20	MET	986	12
daunorubicin	21	MET	986	12
doxorubicin	18	MET	986	12
elacridar	1	MET	986	12
elacridar	17	MET	986	12
elacridar	18	MET	986	12
elacridar	20	MET	986	12
elacridar	21	MET	986	12
hoechst33342	10	MET	986	12
hoechst33342	23	MET	986	12
hoechst33342	25	MET	986	12
ivermectin	0	MET	986	12
ivermectin	1	MET	986	12
ivermectin	3	MET	986	12
ivermectin	4	MET	986	12
ivermectin	6	MET	986	12
ivermectin	8	MET	986	12
ivermectin	14	MET	986	12
ivermectin	15	MET	986	12
ivermectin	16	MET	986	12
ivermectin	17	MET	986	12
ivermectin	19	MET	986	12
ivermectin	20	MET	986	12

ivermectin	21	MET	986	12
ivermectin	23	MET	986	12
ivermectin	24	MET	986	12
lopinavir	1	MET	986	12
lopinavir	3	MET	986	12
lopinavir	7	MET	986	12
lopinavir	16	MET	986	12
lopinavir	17	MET	986	12
lopinavir	20	MET	986	12
lopinavir	22	MET	986	12
paclitaxel	0	MET	986	12
paclitaxel	2	MET	986	12
paclitaxel	3	MET	986	12
paclitaxel	10	MET	986	12
paclitaxel	16	MET	986	12
paclitaxel	18	MET	986	12
paclitaxel	20	MET	986	12
paclitaxel	21	MET	986	12
paclitaxel	24	MET	986	12
paclitaxel	25	MET	986	12
QZ59S_RRR	0	MET	986	12
QZ59S_RRR	3	MET	986	12
QZ59S_RRR	14	MET	986	12
QZ59S_RRR	19	MET	986	12
QZ59S_RRR	21	MET	986	12
QZ59S_RRR	23	MET	986	12
QZ59S_RRR	24	MET	986	12
QZ59S_RRR	25	MET	986	12
QZ59S_SSS	0	MET	986	12
QZ59S_SSS	4	MET	986	12
QZ59S_SSS	15	MET	986	12
QZ59S_SSS	16	MET	986	12
QZ59S_SSS	17	MET	986	12
QZ59S_SSS	18	MET	986	12
QZ59S_SSS	21	MET	986	12
QZ59S_SSS	22	MET	986	12
rhodamine123	1	MET	986	12
rhodamine123	2	MET	986	12
rhodamine123	23	MET	986	12
ritonavir	0	MET	986	12
ritonavir	1	MET	986	12
ritonavir	4	MET	986	12
ritonavir	6	MET	986	12
ritonavir	10	MET	986	12
ritonavir	12	MET	986	12
ritonavir	13	MET	986	12
ritonavir	16	MET	986	12
ritonavir	17	MET	986	12
ritonavir	18	MET	986	12
ritonavir	19	MET	986	12
ritonavir	20	MET	986	12
ritonavir	22	MET	986	12

saquinavir	0	MET	986	12
saquinavir	1	MET	986	12
saquinavir	2	MET	986	12
saquinavir	3	MET	986	12
saquinavir	4	MET	986	12
saquinavir	11	MET	986	12
saquinavir	14	MET	986	12
saquinavir	17	MET	986	12
saquinavir	18	MET	986	12
saquinavir	19	MET	986	12
saquinavir	20	MET	986	12
saquinavir	23	MET	986	12
tamoxifen	1	MET	986	12
tamoxifen	4	MET	986	12
tamoxifen	20	MET	986	12
tamoxifen	21	MET	986	12
tariquidar	0	MET	986	12
tariquidar	7	MET	986	12
tariquidar	11	MET	986	12
tariquidar	16	MET	986	12
tariquidar	21	MET	986	12
valspodar	3	MET	986	12
valspodar	5	MET	986	12
valspodar	7	MET	986	12
valspodar	8	MET	986	12
valspodar	9	MET	986	12
valspodar	10	MET	986	12
valspodar	13	MET	986	12
valspodar	14	MET	986	12
valspodar	15	MET	986	12
valspodar	16	MET	986	12
valspodar	18	MET	986	12
valspodar	23	MET	986	12
valspodar	24	MET	986	12
verapamil	0	MET	986	12
verapamil	1	MET	986	12
verapamil	16	MET	986	12
vinblastine	1	MET	986	12
vinblastine	3	MET	986	12
vinblastine	4	MET	986	12
vinblastine	8	MET	986	12
vinblastine	22	MET	986	12
zosuquidar	13	MET	986	12
989				
biricodar	19	GLY	989	12
biricodar	24	GLY	989	12
cyclosporinA	3	GLY	989	12
cyclosporinA	12	GLY	989	12
cyclosporinA	13	GLY	989	12
cyclosporinA	22	GLY	989	12
cyclosporinA	23	GLY	989	12

cyclosporinA	24	GLY	989	12
daunorubicin	18	GLY	989	12
daunorubicin	21	GLY	989	12
doxorubicin	18	GLY	989	12
elacridar	11	GLY	989	12
hoechst33342	10	GLY	989	12
hoechst33342	23	GLY	989	12
hoechst33342	25	GLY	989	12
ivermectin	4	GLY	989	12
ivermectin	8	GLY	989	12
ivermectin	24	GLY	989	12
lopinavir	20	GLY	989	12
lopinavir	22	GLY	989	12
lopinavir	23	GLY	989	12
paclitaxel	2	GLY	989	12
paclitaxel	21	GLY	989	12
paclitaxel	24	GLY	989	12
paclitaxel	25	GLY	989	12
QZ59S_RRR	21	GLY	989	12
QZ59S_RRR	24	GLY	989	12
QZ59S_RRR	25	GLY	989	12
QZ59S_SSS	0	GLY	989	12
QZ59S_SSS	18	GLY	989	12
QZ59S_SSS	21	GLY	989	12
QZ59S_SSS	22	GLY	989	12
ritonavir	0	GLY	989	12
ritonavir	1	GLY	989	12
ritonavir	3	GLY	989	12
ritonavir	17	GLY	989	12
ritonavir	22	GLY	989	12
ritonavir	23	GLY	989	12
saquinavir	0	GLY	989	12
saquinavir	1	GLY	989	12
saquinavir	2	GLY	989	12
saquinavir	11	GLY	989	12
saquinavir	17	GLY	989	12
saquinavir	18	GLY	989	12
saquinavir	19	GLY	989	12
saquinavir	21	GLY	989	12
saquinavir	23	GLY	989	12
saquinavir	25	GLY	989	12
tariquidar	11	GLY	989	12
tariquidar	17	GLY	989	12
tariquidar	21	GLY	989	12
valspodar	3	GLY	989	12
valspodar	23	GLY	989	12
verapamil	0	GLY	989	12
verapamil	17	GLY	989	12
vinblastine	3	GLY	989	12
vinblastine	4	GLY	989	12
vinblastine	19	GLY	989	12
vinblastine	20	GLY	989	12

vinblastine	22	GLY	989	12
993				
ADP	6	SER	993	12
ADP	8	SER	993	12
ADP	9	SER	993	12
ADP	10	SER	993	12
biricodar	1	SER	993	12
biricodar	17	SER	993	12
biricodar	24	SER	993	12
biricodar	25	SER	993	12
cyclosporinA	0	SER	993	12
cyclosporinA	1	SER	993	12
cyclosporinA	3	SER	993	12
cyclosporinA	5	SER	993	12
cyclosporinA	6	SER	993	12
cyclosporinA	9	SER	993	12
cyclosporinA	12	SER	993	12
cyclosporinA	15	SER	993	12
cyclosporinA	16	SER	993	12
cyclosporinA	19	SER	993	12
cyclosporinA	22	SER	993	12
cyclosporinA	23	SER	993	12
cyclosporinA	24	SER	993	12
cyclosporinA	25	SER	993	12
daunorubicin	21	SER	993	12
daunorubicin	24	SER	993	12
doxorubicin	0	SER	993	12
doxorubicin	4	SER	993	12
doxorubicin	6	SER	993	12
doxorubicin	21	SER	993	12
doxorubicin	24	SER	993	12
elacridar	0	SER	993	12
elacridar	11	SER	993	12
elacridar	24	SER	993	12
hoechst33342	23	SER	993	12
hoechst33342	24	SER	993	12
hoechst33342	25	SER	993	12
ivermectin	2	SER	993	12
ivermectin	10	SER	993	12
ivermectin	16	SER	993	12
ivermectin	24	SER	993	12
ivermectin	25	SER	993	12
lopinavir	2	SER	993	12
lopinavir	4	SER	993	12
lopinavir	9	SER	993	12
lopinavir	19	SER	993	12
lopinavir	20	SER	993	12
lopinavir	21	SER	993	12
lopinavir	22	SER	993	12
lopinavir	23	SER	993	12
lopinavir	24	SER	993	12

paclitaxel	0	SER	993	12
paclitaxel	1	SER	993	12
paclitaxel	9	SER	993	12
paclitaxel	16	SER	993	12
paclitaxel	21	SER	993	12
paclitaxel	24	SER	993	12
paclitaxel	25	SER	993	12
QZ59S_RRR	22	SER	993	12
QZ59S_RRR	23	SER	993	12
QZ59S_RRR	24	SER	993	12
QZ59S_RRR	25	SER	993	12
QZ59S_SSS	18	SER	993	12
QZ59S_SSS	25	SER	993	12
ritonavir	0	SER	993	12
ritonavir	2	SER	993	12
ritonavir	17	SER	993	12
ritonavir	20	SER	993	12
ritonavir	23	SER	993	12
ritonavir	24	SER	993	12
ritonavir	25	SER	993	12
saquinavir	1	SER	993	12
saquinavir	11	SER	993	12
saquinavir	15	SER	993	12
saquinavir	17	SER	993	12
saquinavir	18	SER	993	12
saquinavir	19	SER	993	12
saquinavir	21	SER	993	12
saquinavir	24	SER	993	12
tariquidar	1	SER	993	12
tariquidar	5	SER	993	12
tariquidar	11	SER	993	12
tariquidar	24	SER	993	12
tariquidar	25	SER	993	12
valspodar	0	SER	993	12
valspodar	1	SER	993	12
valspodar	2	SER	993	12
valspodar	3	SER	993	12
valspodar	4	SER	993	12
valspodar	6	SER	993	12
valspodar	13	SER	993	12
valspodar	14	SER	993	12
valspodar	16	SER	993	12
valspodar	18	SER	993	12
valspodar	23	SER	993	12
valspodar	24	SER	993	12
verapamil	0	SER	993	12
verapamil	19	SER	993	12
vinblastine	15	SER	993	12
vinblastine	17	SER	993	12
vinblastine	18	SER	993	12
vinblastine	19	SER	993	12
vinblastine	20	SER	993	12

vinblastine	21	SER	993	12
vinblastine	22	SER	993	12
vinblastine	25	SER	993	12