



J. Serb. Chem. Soc. 78 (4) S30–S36 (2013)

SUPPLEMENTARY MATERIAL TO
**A quantitative structure–activity relationships study for the
anti-HIV-1 activities of 1-[(2-hydroxyethoxy)methyl]-6-
-(phenylthio)thymine derivatives using the multiple linear
regression and partial least squares methodologies**

DANIELA IVAN, LUMINITA CRISAN*, SIMONA FUNAR-TIMOFEI
and MIRCEA MRACEC

*Institute of Chemistry of Romanian Academy, Department of Computational Chemistry,
24 Mihai Viteazul Bvd., 300223, Timisoara, Romania*

J. Serb. Chem. Soc. 78 (4) (2013) 495–506

TABLE S-I. The chemical structure of the studied HEPT derivatives (Fig. 1 in the native paper) and the observed (A_{obs}) anti-HIV-1 activity values

No.	R ₁	R ₂	R ₃	X	Y	A _{obs}
1	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₃	2-CH ₃	O	S	4.15
2	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₃	2-NO ₂	O	S	3.85
3	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₃	2-OCH ₃	O	S	4.72
4	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₃	3-CH ₃	O	S	5.59
5	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₃	3-CH ₂ CH ₃	O	S	5.57
6 ^a	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₃	3-C(CH ₃) ₃	O	S	4.92
7 ^a	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₃	3-CF ₃	O	S	4.35
8	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₃	3-F	O	S	5.48
9 ^a	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₃	3-Cl	O	S	4.89
10	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₃	3-Br	O	S	5.24
11	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₃	3-I	O	S	5.00
12 ^a	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₃	3-NO ₂	O	S	4.47
13	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₃	3-OH	O	S	4.09
14	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₃	3-OCH ₃	O	S	4.66
15	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₃	3,5-(CH ₃) ₂	O	S	6.59
16	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₃	3,5-Cl ₂	O	S	5.89
17 ^a	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₃	3,5-(CH ₃) ₂	S	S	6.66
18	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₃	3-COOCH ₃	O	S	5.10
19 ^a	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₃	3-COCH ₃	O	S	5.14
20	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₃	3-CN	O	S	5.00
21	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₂ CH=CH ₂	H	O	S	5.60
22	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₂ CH ₃	H	S	S	6.96
23	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	S	S	5.00

* Corresponding author. E-mail: lumi_crisan@acad-icht.tm.edu.ro



TABLE S-I. Continued

No.	R ₁	R ₂	R ₃	X	Y	A _{obs}
24 ^a	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH(CH ₃) ₂	H	S	S	7.23
25	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₂ CH ₃	3,5-(CH ₃) ₂	S	S	8.11
26	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH(CH ₃) ₂	3,5-(CH ₃) ₂	S	S	8.30
27	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₂ CH ₃	3,5-Cl ₂	S	S	7.37
28	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₂ CH ₃	H	O	S	6.92
29	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₂ CH ₂ CH ₃	H	O	S	5.47
30	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH(CH ₃) ₂	H	O	S	7.20
31	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₂ CH ₃	3,5-(CH ₃) ₂	O	S	7.89
32	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH(CH ₃) ₂	3,5-(CH ₃) ₂	O	S	8.57
33 ^a	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₂ CH ₃	3,5-Cl ₂	O	S	7.85
34	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₃	4-CH ₃	O	S	3.66
35	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₃	H	O	S	5.15
36	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₃	H	S	S	6.01
37 ^a	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	I	H	O	S	5.44
38	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH=CH ₂	H	O	S	5.69
39	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH=CHC ₆ H ₅	H	O	S	5.22
40	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₂ C ₆ H ₅	H	O	S	4.37
41 ^a	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH=C(C ₆ H ₅) ₂	H	O	S	6.07
42 ^a	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OCH ₃	CH ₃	H	O	S	5.06
43	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OCOOCH ₃	CH ₃	H	O	S	5.17
44	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OCOC ₆ H ₅	CH ₃	H	O	S	5.12
45	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	CH ₃	H	O	S	6.48
46 ^a	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ Cl	CH ₃	H	O	S	5.82
47	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ N ₃	CH ₃	H	O	S	5.24
48	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ F	CH ₃	H	O	S	5.96
49	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ CH ₃	CH ₃	H	O	S	5.48
50	CH ₂ OCH ₂ C ₆ H ₅	CH ₃	H	O	S	7.06
51	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	H	O	S	7.72
52	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	H	S	S	7.58
53	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	3,5-(CH ₃) ₂	O	S	8.24
54	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	3,5-(CH ₃) ₂	S	S	8.30
55	CH ₂ OCH ₂ C ₆ H ₅	CH ₂ CH ₃	H	O	S	8.23
56	CH ₂ OCH ₂ C ₆ H ₅	CH ₂ CH ₃	3,5-(CH ₃) ₂	O	S	8.55
57	CH ₂ OCH ₂ C ₆ H ₅	CH ₂ CH ₃	H	S	S	8.09
58	CH ₂ OCH ₂ C ₆ H ₅	CH ₂ CH ₃	3,5-(CH ₃) ₂	S	S	8.14
59 ^a	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	CH(CH ₃) ₂	H	O	S	7.99
60	CH ₂ OCH ₂ C ₆ H ₅	CH(CH ₃) ₂	H	O	S	8.51
61	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	CH(CH ₃) ₂	H	S	S	7.89
62 ^a	CH ₂ OCH ₂ C ₆ H ₅	CH(CH ₃) ₂	H	S	S	8.14
63	CH ₂ OCH ₃	CH ₃	H	O	S	5.68
64	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	CH ₃	H	O	S	5.33
65	CH ₂ CH ₃	CH ₃	H	O	S	5.66
66	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	CH ₃	H	O	S	5.92
67	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	3,5-Cl ₂	S	S	7.89
68	CH ₂ OCH(CH ₃) ₂	CH ₂ CH ₃	H	S	S	6.66
69 ^a	CH ₂ O- <i>c</i> -C ₆ H ₁₁	CH ₂ CH ₃	H	S	S	5.79

TABLE S-I. Continued

No.	R ₁	R ₂	R ₃	X	Y	A _{obs}
70	CH ₂ OCH ₂ - <i>c</i> -C ₆ H ₁₁	CH ₂ CH ₃	H	S	S	6.45
71	CH ₂ OCH ₂ C ₆ H ₄ (4-CH ₃)	CH ₂ CH ₃	H	S	S	7.11
72 ^a	CH ₂ OCH ₂ C ₆ H ₄ (4-Cl)	CH ₂ CH ₃	H	S	S	7.92
73	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ C ₆ H ₅	CH ₂ CH ₃	H	S	S	7.04
74 ^a	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	3,5-Cl ₂	O	S	8.13
75	CH ₂ OCH(CH ₃) ₂	CH ₂ CH ₃	H	O	S	6.47
76	CH ₂ O- <i>c</i> -C ₆ H ₁₁	CH ₂ CH ₃	H	O	S	5.40
77	CH ₂ OCH ₂ - <i>c</i> -C ₆ H ₁₁	CH ₂ CH ₃	H	O	S	6.35
78	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ C ₆ H ₅	CH ₂ CH ₃	H	O	S	7.02
79 ^a	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	<i>c</i> -C ₃ H ₅	H	S	S	7.02
80	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	<i>c</i> -C ₃ H ₅	H	O	S	7.00
81	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ O- <i>n</i> -C ₅ H ₁₁	CH ₃	H	O	S	4.46
82 ^a	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₃	2-Cl	O	S	3.89
83	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₃	3-CH ₂ OH	O	S	3.53
84	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₃	4-F	O	S	3.60
85	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₃	4-Cl	O	S	3.60
86	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₃	4-NO ₂	O	S	3.72
87	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₃	4-CN	O	S	3.60
88	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₃	4-OH	O	S	3.56
89 ^a	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₃	4-OCH ₃	O	S	3.60
90	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₃	4-COCH ₃	O	S	3.96
91	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₃	4-COOH	O	S	3.45
92	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₃	3-CONH ₂	O	S	3.51
93	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	COOCH ₃	H	O	S	5.18
94	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CONHC ₆ H ₅	H	O	S	4.74
95 ^a	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	SC ₆ H ₅	H	O	S	4.68
96 ^a	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CCH	H	O	S	4.74
97	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CCC ₆ H ₅	H	O	S	5.47
98	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₃	3-NH ₂	O	S	3.60
99 ^a	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	COCH(CH ₃) ₂	H	O	S	4.92
100 ^a	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	COC ₆ H ₅	H	O	S	4.89
101	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CCCH ₃	H	O	S	4.72
102	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	F	H	O	S	4.00
103 ^a	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	Cl	H	O	S	4.52
104 ^a	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	Br	H	O	S	4.70
105 ^a	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OCH ₂ C ₆ H ₅	CH ₃	H	O	S	4.70
106 ^a	H	CH ₃	H	O	S	3.60
107	CH ₃	CH ₃	H	O	S	3.82
108	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₂ CH ₃	H	O	CH ₂	6.45
109 ^a	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₂ CH ₃	CH ₃	O	CH ₂	7.88
110	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	H	O	CH ₂	7.38
111 ^a	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CH ₃	O	CH ₂	8.79
112 ^a	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH(CH ₃) ₂	H	O	CH ₂	7.20
113	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH(CH ₃) ₂	CH ₃	O	CH ₂	8.56
114	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	CH(CH ₃) ₂	H	O	CH ₂	7.37
115	CH ₂ OCH ₂ CH ₃	CH(CH ₃) ₂	CH ₃	O	CH ₂	9.22

TABLE S-I. Continued

No.	R ₁	R ₂	R ₃	X	Y	A _{obs}
116	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	H	O	CH ₂	6.67
117	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	CH(CH ₃) ₂	H	O	CH ₂	7.37
118	CH ₂ CH ₂ OCH ₃	CH ₂ CH ₃	H	O	CH ₂	6.60
119	CH ₂ CH ₂ OCH ₃	CH(CH ₃) ₂	H	O	CH ₂	7.28
120	CH ₂ OCH ₂ OCH ₃	CH ₃	H	O	CH ₂	4.63
121	CH ₂ SCH ₃	CH ₂ CH ₃	H	O	CH ₂	8.68
122 ^a	CH ₂ SCH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	H	O	CH ₂	7.39
123	CH ₂ SCH ₃	CH ₂ CH ₃	CH ₃	O	CH ₂	7.30
124	CH ₂ SCH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CH ₃	O	CH ₂	8.39
125	CH ₂ SCH ₃	CH(CH ₃) ₂	H	O	CH ₂	7.69
126	CH ₂ SCH ₂ CH ₃	CH(CH ₃) ₂	H	O	CH ₂	8.22
127	CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH	CH ₃	H	O	O	5.05

^aCompounds used as the test setTABLE S-II. The predicted (A_{pred}^{MLR}) anti-HIV-1 activity values and the selected molecular descriptors included in the final MLR model, and predicted activity value obtained by the PLS method (A_{pred}^{PLS})

No.	A _{pred} ^{MLR} ^a	DELS	X0A	GGI3	GATS1v	R4u	A _{pred} ^{PLS} ^a
1	5.23	28.795	0.732	1.688	1.688	1.688	4.59
2	3.71	45.114	0.737	2.063	2.063	2.063	3.72
3	5.3	32.565	0.731	1.688	1.688	1.688	4.65
4	5.6	28.698	0.732	1.813	1.813	1.813	5.16
5	5.88	29.301	0.731	1.813	1.813	1.813	5.23
6 ^b	5.09	30.645	0.745	2.188	2.188	2.188	5.89
7 ^b	2.05	57.318	0.745	2.188	2.188	2.188	3.25
8	4.25	38.722	0.732	1.813	1.813	1.813	4.30
9 ^b	4.98	32.197	0.732	1.813	1.813	1.813	4.72
10	4.97	29.913	0.732	1.813	1.813	1.813	4.94
11	4.75	28.856	0.732	1.813	1.813	1.813	5.08
12 ^b	3.36	43.993	0.737	1.938	1.938	1.938	3.48
13	4.48	35.366	0.732	1.813	1.813	1.813	4.27
14	5.69	32.199	0.731	1.813	1.813	1.813	4.45
15	6.84	29.204	0.738	2.25	2.25	2.25	6.36
16	5.42	36.155	0.738	2.25	2.25	2.25	5.24
17 ^b	7.37	23.668	0.738	2.25	2.25	2.25	6.82
18	4.4	40.726	0.736	1.938	1.938	1.938	4.29
19 ^b	4.62	37.93	0.737	1.938	1.938	1.938	4.37
20	4.61	34.556	0.731	1.813	1.813	1.813	4.51
21	5.47	30.928	0.724	1.625	1.625	1.625	5.49
22	6.31	23.231	0.725	1.625	1.625	1.625	6.14
23	6.42	23.897	0.724	1.625	1.625	1.625	6.27
24 ^b	7	23.945	0.731	2	2	2	6.97
25	8.14	24.613	0.737	2.375	2.375	2.375	7.46
26	8.75	25.361	0.742	2.75	2.75	2.75	8.28

TABLE S-II. Continued

No.	$A_{\text{pred}}^{\text{MLR}^a}$	<i>DELS</i>	<i>X0A</i>	<i>GGI3</i>	<i>GATS1v</i>	<i>R4u</i>	$A_{\text{pred}}^{\text{PLS}^a}$
27	6.85	31.142	0.737	2.375	2.375	2.375	6.65
28	5.71	29.198	0.725	1.625	1.625	1.625	5.73
29	5.63	29.835	0.724	1.625	1.625	1.625	5.84
30	6.51	29.986	0.731	2	2	2	6.67
31	7.46	30.179	0.737	2.375	2.375	2.375	7.22
32	8.25	31.002	0.742	2.75	2.75	2.75	7.97
33 ^b	6.23	37.167	0.737	2.375	2.375	2.375	6.32
34	4.53	28.629	0.732	1.563	1.563	1.563	4.69
35	4.98	28.322	0.726	1.5	1.5	1.5	4.74
36	5.54	22.389	0.726	1.5	1.5	1.5	5.21
37 ^b	4.14	28.291	0.726	1.5	1.5	1.5	5.40
38	5.63	30.149	0.725	1.625	1.625	1.625	5.32
39	5.81	31.438	0.706	1.563	1.563	1.563	5.72
40	5.41	31.526	0.706	1.563	1.563	1.563	5.83
41 ^b	7.07	33.87	0.699	2	2	2	7.54
42 ^b	5.46	26.413	0.725	1.5	1.5	1.5	5.28
43	4.62	35.504	0.729	1.625	1.625	1.625	4.68
44	5.9	37.708	0.712	1.938	1.938	1.938	5.23
45	5.9	22.957	0.727	1.5	1.5	1.5	5.80
46 ^b	5.34	26.066	0.726	1.5	1.5	1.5	5.61
47	5.16	28.585	0.724	1.5	1.5	1.5	5.04
48	4.86	30.71	0.726	1.5	1.5	1.5	4.89
49	5.82	23.545	0.726	1.5	1.5	1.5	5.56
50	6.13	24.845	0.706	1.563	1.563	1.563	6.13
51	6.87	23.74	0.726	1.625	1.625	1.625	6.62
52	7.5	17.916	0.726	1.625	1.625	1.625	6.96
53	8.46	24.877	0.738	2.375	2.375	2.375	8.08
54	9.18	19.399	0.738	2.375	2.375	2.375	8.35
55	6.57	25.628	0.706	1.688	1.688	1.688	6.98
56	7.84	25.912	0.718	2.313	2.313	2.313	7.37
57	7.2	19.529	0.706	1.688	1.688	1.688	7.47
58	9.09	21.051	0.718	2.438	2.438	2.438	8.46
59 ^b	7.57	24.445	0.732	2	2	2	7.63
60	7.27	26.333	0.712	2.063	2.063	2.063	7.73
61	8.16	18.594	0.732	2	2	2	7.95
62 ^b	8.09	20.232	0.712	2.063	2.063	2.063	8.26
63	5.67	22.002	0.728	1.5	1.5	1.5	5.38
64	5.54	24.118	0.725	1.5	1.5	1.5	5.55
65	6	18.73	0.729	1.5	1.5	1.5	6.18
66	6.16	19.75	0.727	1.5	1.5	1.5	6.23
67	8.14	25.745	0.738	2.375	2.375	2.375	7.38
68	6.71	18.578	0.732	1.625	1.625	1.625	7.70
69 ^b	6.61	20.26	0.706	1.563	1.563	1.563	7.83
70	7.35	20.081	0.706	1.688	1.688	1.688	7.73

TABLE S-II. Continued

No.	$A_{\text{pred}}^{\text{MLR}^a}$	<i>DELS</i>	<i>X0A</i>	<i>GGI3</i>	<i>GATS1v</i>	<i>R4u</i>	$A_{\text{pred}}^{\text{PLS}^a}$
71	6.8	20.26	0.712	1.75	1.75	1.75	7.45
72^b	6.54	23.036	0.712	1.75	1.75	1.75	7.15
73	7.2	20.04	0.706	1.688	1.688	1.688	7.44
74^b	7.28	31.681	0.738	2.375	2.375	2.375	7.09
75	5.9	24.499	0.732	1.625	1.625	1.625	7.38
76	6.02	26.237	0.706	1.563	1.563	1.563	7.38
77	6.55	26.066	0.706	1.688	1.688	1.688	7.22
78	6.48	25.919	0.706	1.688	1.688	1.688	6.97
79^b	7.78	18.887	0.706	1.556	1.556	1.556	7.30
80	7.38	24.606	0.706	1.556	1.556	1.556	7.02
81	5.16	28.833	0.722	1.5	1.5	1.5	5.76
82^b	4.44	32.593	0.732	1.688	1.688	1.688	4.26
83	4.65	35.144	0.731	1.813	1.813	1.813	4.33
84	3.45	38.107	0.732	1.563	1.563	1.563	4.13
85	4.1	31.953	0.732	1.563	1.563	1.563	4.45
86	2.81	43.235	0.737	1.813	1.813	1.813	3.39
87	3.64	34.215	0.731	1.563	1.563	1.563	4.28
88	3.54	34.942	0.732	1.563	1.563	1.563	3.87
89^b	4.58	31.967	0.731	1.563	1.563	1.563	4.09
90	4.05	37.465	0.737	1.813	1.813	1.813	4.24
91	2.97	42.161	0.737	1.813	1.813	1.813	3.54
92	4.04	39.868	0.737	1.938	1.938	1.938	3.94
93	5.49	41.535	0.73	2	2	2	4.88
94	5.95	43.411	0.712	2.188	2.188	2.188	5.33
95^b	5.64	31.439	0.706	1.563	1.563	1.563	5.98
96^b	5.09	31.372	0.725	1.625	1.625	1.625	5.05
97	5.73	32.936	0.706	1.563	1.563	1.563	5.61
98	4.89	32.011	0.732	1.813	1.813	1.813	4.47
99^b	4.62	41.287	0.736	2	2	2	5.91
100^b	5.63	43.404	0.712	2.188	2.188	2.188	5.81
101	6.03	30.251	0.724	1.625	1.625	1.625	5.31
102	3.62	38.773	0.726	1.5	1.5	1.5	4.02
103^b	4.39	31.557	0.726	1.5	1.5	1.5	4.43
104^b	4.43	29.031	0.726	1.5	1.5	1.5	4.89
105^b	5.87	28.993	0.706	1.563	1.563	1.563	5.69
106^b	5.32	17.216	0.721	1.188	1.188	1.188	4.69
107	5.43	18.036	0.73	1.375	1.375	1.375	5.06
108	5.66	29.288	0.725	1.625	1.625	1.625	5.97
109^b	7.57	30.498	0.737	2.375	2.375	2.375	7.33
110	6.89	23.82	0.726	1.625	1.625	1.625	6.80
111^b	8.37	25.185	0.738	2.375	2.375	2.375	8.21
112^b	6.47	30.077	0.731	2	2	2	6.86
113	8.18	31.321	0.742	2.75	2.75	2.75	8.19
114	7.48	24.525	0.732	2	2	2	7.75

TABLE S-II. Continued

No.	$A_{\text{pred}}^{\text{MLR}^a}$	<i>DELS</i>	<i>X0A</i>	<i>GGI3</i>	<i>GATS1v</i>	<i>R4u</i>	$A_{\text{pred}}^{\text{PLS}^a}$
115	9.12	25.924	0.744	2.75	2.75	2.75	9.03
116	6.93	20.619	0.726	1.625	1.625	1.625	7.16
117	7.38	21.277	0.732	2	2	2	7.81
118	6.41	23.286	0.726	1.625	1.625	1.625	6.55
119	7.19	23.974	0.732	2	2	2	7.28
120	5.47	25.661	0.726	1.5	1.5	1.5	5.57
121	6.3	19.966	0.727	1.625	1.625	1.625	6.95
122^b	6.85	20.477	0.726	1.625	1.625	1.625	7.19
123	8.08	21.4	0.74	2.375	2.375	2.375	8.38
124	8.51	21.955	0.738	2.375	2.375	2.375	8.61
125	7.11	20.619	0.734	2	2	2	7.84
126	7.61	21.135	0.732	2	2	2	8.14
127	5.14	32.136	0.726	1.5	1.5	1.5	4.55

^aPredicted activity values obtained by the MLR ($A_{\text{pred}}^{\text{MLR}}$) and PLS ($A_{\text{pred}}^{\text{PLS}}$) approaches; *DELS* represents the molecular electrotopological variation; *X0A* represents the average connectivity index of order 0; *GGI3* represents the topological charge index of order 3; *GATS1v* represents the Geary autocorrelation of lag 1 weighted by the van der Waals volume; *R4u* represents the *R* autocorrelation of lag 4 / unweighted; ^bcompounds used as the test set