



Supporting Information

© Copyright Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 69451 Weinheim, 2013

Table S1-1. Inter-correlations between 48 selected descriptors and activity are listed.

	A ⁰	D ¹	D ²	D ³	D ⁴	D ⁵	D ⁶	D ⁷	D ⁸	D ⁹	D ¹⁰	D ¹¹	D ¹²	D ¹³	D ¹⁴	D ¹⁵	D ¹⁶	D ¹⁷	D ¹⁸	D ¹⁹	D ²⁰	D ²¹	D ²²	D ²³	D ²⁴
D ¹	0.229	1.000																							
D ²	-0.205	0.062	1.000																						
D ³	-0.183	0.168	0.673	1.000																					
D ⁴	-0.171	0.083	0.659	0.440	1.000																				
D ⁵	-0.348	-0.396	0.173	0.122	0.185	1.000																			
D ⁶	0.198	-0.101	-0.057	-0.166	-0.055	-0.428	1.000																		
D ⁷	0.294	0.121	0.003	-0.100	-0.023	-0.645	0.861	1.000																	
D ⁸	0.214	0.238	-0.441	-0.200	-0.164	-0.042	0.235	0.117	1.000																
D ⁹	0.202	0.045	-0.518	-0.559	-0.452	-0.145	0.189	0.199	0.193	1.000															
D ¹⁰	-0.325	-0.415	0.203	0.259	0.241	0.553	-0.225	-0.386	-0.048	-0.323	1.000														
D ¹¹	0.159	0.005	-0.520	-0.540	-0.317	-0.117	0.244	0.220	0.203	0.498	-0.197	1.000													
D ¹²	-0.129	-0.562	-0.266	-0.224	-0.163	0.378	0.185	0.028	0.098	0.240	0.383	0.305	1.000												
D ¹³	0.122	0.269	-0.282	-0.103	-0.028	0.042	0.024	-0.015	0.720	0.082	0.003	0.203	0.075	1.000											
D ¹⁴	0.139	-0.061	-0.087	-0.157	-0.079	-0.196	0.402	0.341	0.035	0.215	-0.328	0.233	-0.063	-0.256	1.000										
D ¹⁵	-0.294	-0.346	0.438	0.272	0.519	0.771	-0.350	-0.468	-0.167	-0.350	0.655	-0.230	0.212	0.007	-0.194	1.000									
D ¹⁶	0.185	0.097	0.249	-0.015	0.167	-0.425	0.606	0.796	-0.143	0.162	-0.379	0.119	0.038	-0.172	0.308	-0.261	1.000								
D ¹⁷	0.351	0.569	-0.043	0.058	-0.133	-0.630	0.226	0.416	0.096	0.070	-0.527	-0.154	-0.385	0.075	0.070	-0.570	0.357	1.000							
D ¹⁸	0.196	0.467	-0.023	0.072	0.108	-0.086	0.110	0.165	0.592	0.101	-0.117	0.025	-0.118	0.478	0.002	-0.070	0.090	0.269	1.000						
D ¹⁹	0.115	0.496	0.005	0.128	0.138	-0.020	0.047	0.065	0.669	0.008	-0.069	-0.009	-0.159	0.593	-0.026	-0.016	-0.005	0.225	0.822	1.000					
D ²⁰	-0.229	-0.749	0.017	-0.082	-0.047	0.191	0.075	-0.026	-0.583	0.007	0.289	0.055	0.396	-0.512	0.141	0.224	0.066	-0.455	-0.698	-0.749	1.000				
D ²¹	-0.239	-0.670	0.129	-0.079	0.015	0.307	0.017	-0.103	-0.487	-0.023	0.321	0.049	0.315	-0.444	0.144	0.336	-0.001	-0.525	-0.484	-0.540	0.805	1.000			
D ²²	-0.213	-0.652	-0.032	-0.124	-0.031	0.139	0.045	-0.016	-0.488	-0.079	0.280	0.075	0.310	-0.450	0.169	0.217	0.061	-0.431	-0.511	-0.574	0.837	0.764	1.000		
D ²³	0.356	0.568	-0.312	-0.335	-0.283	-0.610	0.184	0.377	0.161	0.337	-0.598	0.280	-0.265	0.169	0.080	-0.629	0.324	0.720	0.240	0.199	-0.464	-0.506	-0.377	1.000	
D ²⁴	0.267	0.586	-0.115	-0.237	-0.008	-0.508	0.130	0.306	0.148	0.080	-0.405	0.184	-0.395	0.205	0.057	-0.360	0.219	0.519	0.294	0.285	-0.544	-0.471	-0.337	0.716	1.000
D ²⁵	0.183	0.233	0.017	-0.150	-0.256	-0.229	-0.062	0.037	-0.156	0.259	-0.479	0.042	-0.298	-0.137	0.069	-0.393	0.124	0.308	0.003	-0.020	-0.287	-0.232	-0.287	0.423	0.346
D ²⁶	0.309	0.413	-0.209	-0.292	-0.351	-0.460	0.027	0.202	-0.060	0.319	-0.659	0.152	-0.381	-0.066	0.142	-0.595	0.233	0.577	0.075	0.033	-0.357	-0.323	-0.340	0.743	0.501
D ²⁷	0.329	0.644	-0.188	-0.208	-0.208	-0.336	0.000	0.139	0.357	0.264	-0.556	0.112	-0.398	0.274	0.025	-0.461	0.130	0.576	0.461	0.455	-0.768	-0.621	-0.662	0.728	0.571
D ²⁸	0.325	0.497	-0.192	-0.169	-0.180	-0.628	0.103	0.354	0.071	0.191	-0.448	-0.083	-0.274	0.122	-0.071	-0.501	0.257	0.762	0.282	0.200	-0.419	-0.510	-0.330	0.683	0.616
D ²⁹	-0.157	0.186	0.069	0.127	0.115	0.195	-0.327	-0.313	-0.032	-0.111	0.168	-0.079	-0.025	0.091	-0.226	0.260	-0.342	-0.205	0.081	0.125	-0.136	-0.157	-0.137	-0.194	-0.033
D ³⁰	0.146	0.063	-0.013	0.034	0.167	-0.050	-0.055	0.039	0.097	-0.089	0.096	-0.020	0.070	0.077	-0.239	0.114	0.051	0.010	0.067	0.046	-0.072	-0.097	-0.069	0.029	0.114
D ³¹	-0.181	0.022	0.523	0.261	0.587	0.419	-0.137	-0.102	-0.076	-0.184	0.313	-0.200	0.144	0.105	-0.240	0.559	0.170	-0.243	0.213	0.202	-0.060	0.050	-0.091	-0.321	-0.176
D ³²	0.321	0.525	-0.420	-0.412	-0.297	-0.360	0.126	0.260	0.529	0.363	-0.410	0.284	-0.091	0.533	-0.065	-0.385	0.124	0.456	0.515	0.486	-0.608	-0.572	-0.467	0.603	0.546

D ³³	-0.222	0.030	0.506	0.297	0.638	0.452	-0.281	-0.240	-0.194	-0.287	0.347	-0.236	0.068	0.021	-0.232	0.672	0.025	-0.305	0.118	0.117	0.008	0.061	-0.019	-0.410	-0.195
D ³⁴	0.229	0.757	0.292	0.376	0.241	-0.269	-0.094	0.116	0.196	-0.104	-0.366	-0.244	-0.511	0.222	-0.111	-0.189	0.195	0.606	0.527	0.550	-0.786	-0.660	-0.680	0.423	0.458
D ³⁵	-0.179	0.372	0.499	0.485	0.653	0.221	-0.324	-0.252	0.058	-0.371	0.157	-0.407	-0.361	0.056	-0.162	0.352	-0.114	-0.128	0.277	0.343	-0.390	-0.256	-0.307	-0.240	0.046
D ³⁶	0.176	0.507	-0.045	0.083	0.108	0.002	0.043	0.045	0.793	0.041	-0.116	0.023	-0.158	0.802	-0.103	-0.006	-0.077	0.203	0.727	0.816	-0.797	-0.615	-0.683	0.181	0.257
D ³⁷	0.114	0.340	-0.086	0.095	0.029	0.061	-0.078	-0.107	0.551	-0.028	-0.022	0.004	-0.067	0.610	-0.107	0.012	-0.201	0.081	0.471	0.556	-0.554	-0.429	-0.483	0.070	0.123
D ³⁸	-0.178	-0.526	-0.165	-0.138	0.139	0.318	0.131	-0.031	0.075	0.012	0.394	0.173	0.450	0.060	0.064	0.372	-0.072	-0.491	-0.022	-0.043	0.383	0.328	0.383	-0.412	-0.325
D ³⁹	0.273	0.272	0.041	-0.072	-0.198	-0.558	0.219	0.398	-0.283	0.234	-0.568	0.078	-0.280	-0.248	0.198	-0.555	0.420	0.534	-0.079	-0.139	-0.040	-0.105	-0.019	0.565	0.377
D ⁴⁰	0.284	0.729	-0.146	-0.032	-0.162	-0.293	-0.073	0.097	0.396	0.239	-0.405	0.127	-0.280	0.337	-0.134	-0.403	0.051	0.407	0.504	0.516	-0.737	-0.644	-0.610	0.539	0.421
D ⁴¹	0.230	0.770	0.103	0.214	-0.077	-0.348	-0.167	0.064	0.090	0.065	-0.385	-0.119	-0.476	0.189	-0.107	-0.349	0.127	0.579	0.348	0.373	-0.615	-0.535	-0.519	0.536	0.440
D ⁴²	0.000	-0.057	0.057	-0.056	-0.034	-0.046	0.026	0.092	-0.239	0.041	0.005	0.109	0.133	-0.244	0.013	-0.019	0.129	-0.042	-0.128	-0.181	0.168	0.095	0.134	0.029	0.119
D ⁴³	0.094	0.209	-0.240	-0.198	-0.205	0.136	-0.151	-0.207	0.398	0.162	-0.201	0.032	-0.158	0.292	-0.032	-0.092	-0.203	0.085	0.330	0.381	-0.484	-0.298	-0.357	0.164	0.062
D ⁴⁴	0.099	0.013	-0.115	-0.167	-0.202	-0.055	-0.038	0.013	-0.036	0.089	-0.033	0.162	0.036	-0.177	0.037	-0.112	-0.031	-0.033	-0.050	-0.084	0.022	0.021	0.039	0.090	0.123
D ⁴⁵	0.114	0.028	-0.075	-0.129	-0.107	-0.067	-0.001	0.004	-0.056	0.073	-0.049	0.025	0.029	-0.240	-0.019	-0.136	0.001	0.041	-0.074	-0.098	0.016	-0.005	-0.024	0.051	0.079
D ⁴⁶	0.099	0.151	0.307	0.203	0.182	0.010	-0.043	0.031	-0.066	-0.122	-0.039	-0.120	-0.141	0.037	-0.068	0.090	0.122	0.143	0.214	0.193	-0.219	-0.149	-0.249	0.013	0.107
D ⁴⁷	0.107	0.271	-0.264	-0.104	-0.009	0.078	-0.084	-0.097	0.680	0.095	0.019	0.097	0.005	0.852	-0.336	-0.005	-0.174	0.083	0.462	0.557	-0.484	-0.406	-0.386	0.167	0.131
D ⁴⁸	-0.008	0.064	0.296	0.456	0.270	0.085	-0.121	-0.047	-0.045	-0.310	0.117	-0.142	-0.066	0.031	-0.061	0.206	0.047	-0.038	0.087	0.124	-0.046	-0.066	-0.045	-0.136	-0.077

Table S1-2. Inter-correlations between 48 selected descriptors and activity are listed.

	A ⁰	D ²⁵	D ²⁶	D ²⁷	D ²⁸	D ²⁹	D ³⁰	D ³¹	D ³²	D ³³	D ³⁴	D ³⁵	D ³⁶	D ³⁷	D ³⁸	D ³⁹	D ⁴⁰	D ⁴¹	D ⁴²	D ⁴³	D ⁴⁴	D ⁴⁵	D ⁴⁶	D ⁴⁷	
D ¹	0.229																								
D ²	-0.205																								
D ³	-0.183																								
D ⁴	-0.171																								
D ⁵	-0.348																								
D ⁶	0.198																								
D ⁷	0.294																								
D ⁸	0.214																								
D ⁹	0.202																								
D ¹⁰	-0.325																								
D ¹¹	0.159																								
D ¹²	-0.129																								
D ¹³	0.122																								
D ¹⁴	0.139																								
D ¹⁵	-0.294																								
D ¹⁶	0.185																								
D ¹⁷	0.351																								
D ¹⁸	0.196																								
D ¹⁹	0.115																								
D ²⁰	-0.229																								
D ²¹	-0.239																								
D ²²	-0.213																								
D ²³	0.356																								
D ²⁴	0.267																								
D ²⁵	0.183	1.000																							
D ²⁶	0.309	0.651	1.000																						
D ²⁷	0.329	0.508	0.818	1.000																					
D ²⁸	0.325	0.225	0.470	0.483	1.000																				
D ²⁹	-0.157	-0.251	-0.299	-0.175	-0.005	1.000																			
D ³⁰	0.146	-0.203	-0.137	-0.002	0.127	0.025	1.000																		
D ³¹	-0.181	-0.339	-0.344	-0.133	-0.151	0.113	0.100	1.000																	
D ³²	0.321	0.085	0.365	0.589	0.659	0.095	0.067	-0.061	1.000																

D ³³	-0.222	-0.421	-0.455	-0.264	-0.174	0.479	0.163	0.842	-0.099	1.000															
D ³⁴	0.229	0.402	0.386	0.656	0.452	0.021	0.115	0.131	0.390	0.115	1.000														
D ³⁵	-0.179	-0.115	-0.207	0.086	-0.051	0.246	0.118	0.527	-0.085	0.541	0.467	1.000													
D ³⁶	0.176	-0.020	0.036	0.494	0.175	0.144	0.009	0.200	0.587	0.122	0.550	0.360	1.000												
D ³⁷	0.114	-0.083	-0.041	0.301	0.039	0.130	0.035	0.145	0.342	0.103	0.345	0.228	0.650	1.000											
D ³⁸	-0.178	-0.490	-0.487	-0.456	-0.361	0.082	0.059	0.149	-0.168	0.209	-0.501	-0.132	-0.103	0.002	1.000										
D ³⁹	0.273	0.607	0.600	0.339	0.431	-0.359	-0.090	-0.354	0.116	-0.497	0.280	-0.253	-0.217	-0.276	-0.431	1.000									
D ⁴⁰	0.284	0.351	0.439	0.709	0.424	-0.035	0.133	-0.018	0.559	-0.170	0.630	0.206	0.507	0.359	-0.441	0.401	1.000								
D ⁴¹	0.230	0.483	0.481	0.602	0.464	-0.061	0.017	-0.085	0.356	-0.162	0.706	0.167	0.342	0.256	-0.634	0.428	0.718	1.000							
D ⁴²	0.000	0.080	-0.055	-0.147	0.081	0.053	0.106	-0.030	-0.077	0.034	-0.091	-0.138	-0.309	-0.226	0.001	0.116	-0.047	-0.025	1.000						
D ⁴³	0.094	0.219	0.305	0.552	-0.016	-0.151	-0.029	-0.070	0.302	-0.135	0.345	0.104	0.424	0.405	-0.132	-0.048	0.423	0.238	-0.324	1.000					
D ⁴⁴	0.099	0.150	0.040	0.027	0.044	-0.032	0.147	-0.199	0.005	-0.146	-0.070	-0.183	-0.207	-0.123	-0.048	0.084	0.112	0.057	0.756	-0.078	1.000				
D ⁴⁵	0.114	0.099	0.060	0.038	0.047	0.038	0.132	-0.117	-0.059	-0.086	-0.050	-0.143	-0.232	-0.129	-0.046	0.064	0.042	-0.005	0.555	-0.163	0.686	1.000			
D ⁴⁶	0.099	0.172	0.045	0.107	0.062	0.012	0.018	0.165	0.025	0.152	0.310	0.104	0.149	0.104	-0.155	0.018	0.072	0.262	0.242	-0.030	0.099	0.086	1.000		
D ⁴⁷	0.107	-0.078	-0.030	0.296	0.094	0.002	0.136	0.097	0.468	-0.013	0.236	0.118	0.731	0.516	0.020	-0.203	0.370	0.238	-0.329	0.375	-0.211	-0.240	-0.016	1.000	
D ⁴⁸	-0.008	-0.152	-0.150	-0.078	-0.146	-0.002	0.153	0.162	-0.153	0.186	0.148	0.188	0.076	0.118	-0.003	-0.094	0.032	0.101	-0.009	-0.134	-0.007	-0.016	0.177	0.060	

A⁰: Activity; D¹: a_acc; D²: a_icm; D³: a_nN; D⁴: a_nS; D⁵: BCUT_SLOGP_1; D⁶: BCUT_SLOGP_2; D⁷: BCUT_SMR_2; D⁸: chi1_C; D⁹: GCUT_PEOE_0; D¹⁰: GCUT_PEOE_1;
D¹¹: GCUT_SLOGP_0; D¹²: GCUT_SLOGP_1; D¹³: GCUT_SLOGP_3; D¹⁴: GCUT_SMR_0; D¹⁵: GCUT_SMR_1; D¹⁶: GCUT_SMR_2; D¹⁷: lip_don; D¹⁸: lip_violation; D¹⁹: opr_violation;
D²⁰: PEOE_PC-; D²¹: PEOE_RPC+; D²²: PEOE_RPC-; D²³: PEOE_VSA+4; D²⁴: PEOE_VSA-6; D²⁵: PEOE_VSA_FPNEG; D²⁶: PEOE_VSA_FPPOS; D²⁷: PEOE_VSA_PPOS; D²⁸: SlogP_VSA0;
D²⁹: SlogP_VSA5; D³⁰: SlogP_VSA8; D³¹: SlogP_VSA9; D³²: SMR_VSA3; D³³: SMR_VSA7; D³⁴: TPSA; D³⁵: vsa_acc; D³⁶: weinerPol; D³⁷: std_dim2; D³⁸: vsurf_CP; D³⁹: vsurf_CW2;
D⁴⁰: vsurf_HB1; D⁴¹: vsurf_HB5; D⁴²: RDF_PiChg_35; D⁴³: RDF_TotChg_23; D⁴⁴: RDF_TotChg_35; D⁴⁵: RDF_TotChg_36; D⁴⁶: RDF_LpEN_52; D⁴⁷: RDF_Polariz_16; D⁴⁸: RDF_Polariz_21.