

**Supplemental file**

**Quantitative structure–toxicity relationships of organic  
compounds towards fathead minnow**

Chen Xingmei, Limin Dang\*, Hai Yang, Xianwei Huang\*, and Xinliang Yu\*

Hunan Provincial Key Laboratory of Environmental Catalysis & Waste Regeneration,  
College of Materials and Chemical Engineering, Hunan Institute of Engineering, Xiangtan,  
Hunan 411104, China

\*Corresponding author:

Limin Dang: Tel. +86 0731-58680049; Fax: +86 0731-58680125; E-mail:

l3055155812@163.com; ORCID: 0000-0001-7625-1410

Xianwei Huang: Tel. +86 0731-58680049; Fax: +86 0731-58680125; E-mail:

hxw1o3o@126.com; ORCID: 0000-0002-5346-5579

Xinliang Yu: Tel. +86 731 58680049; Fax: +86 731 58680125; E-mail: yxl@hnie.edu.cn;

ORCID: 0000-0002-0952-3567; Present/permanent address: Donghu Road 18#, Xiangtan,

Hunan 411104, China

**Table S1**

Experimental and prediction toxicities of 963 compounds.

No.	CAS	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (exp.)	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (SVM)
Training set			
1	104881	4.81	3.82
2	2385855	6.74	6.75
3	2691410	4.3	4.31
4	28553120	6.47	6.46
5	309002	7.65	7.75
6	1071836	3.4	3.39
7	67561	0.04	0.05
8	82713	5.91	5.90
9	33820530	6	6.49
10	78342	4.69	4.70
11	104405	6.2	6.57
12	76017	4.43	4.73
13	7209383	1.81	1.60
14	6284839	6.09	6.75
15	4151502	6.45	6.44
16	32534955	4.24	5.80
17	52686	4.51	4.50
18	110167	4.37	3.68
19	143500	6.07	6.08
20	55389	4.96	4.79
21	3347226	6.25	6.15
22	75092	2.41	2.65
23	3380345	6.05	6.04
24	3206313	4.24	4.22

No.	CAS	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (exp.)	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (SVM)
25	693210	2.6	2.61
26	16672870	3.05	3.86
27	110543	4.54	4.53
28	22431625	8.57	8.58
29	1770805	6.7	6.69
30	786196	6.16	6.11
31	84695	5.49	5.23
32	596850	6.38	5.73
33	920661	2.84	2.59
34	133073	6	5.68
35	121824	4.31	4.32
36	132649	5.05	5.21
37	12789036	6.9	6.91
38	2104645	6.59	5.67
39	2034222	4.7	4.12
40	999973	2.99	3.29
41	107153	3.44	1.65
42	13411160	5.48	4.48
43	115297	8.47	7.38
44	60297	1.46	1.85
45	66762	4.82	5.47
46	60004	3.69	3.70
47	1445756	2.45	2.65
48	107222	2.33	3.04
49	34364426	6.65	6.66
50	17109363	7.69	7.67
51	70304	7.29	6.74
52	629196	4.76	4.75

No.	CAS	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (exp.)	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (SVM)
53	137268	5.95	4.84
54	77736	3.41	4.38
55	79118	2.81	2.76
56	121573	3.24	3.23
57	50000	3.1	3.11
58	107493	6.08	4.26
59	513815	4.08	4.65
60	6948863	2.62	2.77
61	86500	6.7	4.91
62	95636	4.19	4.14
63	5598130	5.68	5.87
64	618622	4.63	4.58
65	57067	6.06	4.96
66	145733	5.39	3.56
67	618871	3.93	4.08
68	100016	3.04	3.30
69	19398131	5.57	5.74
70	1241947	5.98	6.01
71	87729	0.6	2.39
72	2357473	3.78	3.84
73	608719	6.72	6.31
74	78513	4.55	4.56
75	79947	6	6.43
76	7700176	4.42	4.52
77	112801	3.14	6.66
78	40596698	7.49	5.70
79	6491027	6.08	6.09
80	300765	5.06	5.47

No.	CAS	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (exp.)	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (SVM)
81	107051	3.54	3.67
82	791286	3.72	3.91
83	563122	5.73	5.74
84	52645531	7.39	7.40
85	1689834	4.74	4.75
86	287923	3.41	3.42
87	7785708	5.69	5.35
88	3252435	5.56	3.44
89	19902046	6.35	6.36
90	66441234	4.71	6.26
91	87912	2.5	2.51
92	117817	5.59	5.64
93	75218	2.72	1.70
94	22367766	3.13	3.12
95	2310170	6.06	6.07
96	2495376	4.58	4.16
97	2894511	5.04	5.03
98	111159	3.5	2.65
99	3481207	5.93	5.30
100	584792	6.58	6.12
101	30560191	5.26	3.83
102	23135220	4.51	3.79
103	2809214	1.98	3.83
104	67663	3.23	3.14
105	5331919	4.8	4.93
106	60571	7.33	6.81
107	868859	2.69	3.12
108	101553	5.64	5.87

No.	CAS	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (exp.)	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (SVM)
109	33878501	5.9	5.84
110	75354	2.86	3.55
111	84628	6.6	6.18
112	67721	5.22	5.45
113	127184	4	4.54
114	111477	3.74	3.92
115	111966	1.2	1.19
116	107028	6.52	3.78
117	26896184	4.39	4.40
118	74908	5.3	3.53
119	15673004	2.23	2.88
120	111831	5.36	5.21
121	57055397	5.76	6.20
122	2245387	4.42	5.35
123	39515418	8.17	7.10
124	14064109	5.31	3.66
125	3179906	3.84	4.84
126	16752775	4.89	3.64
127	68122	0.84	1.75
128	2475469	5.47	4.85
129	79776	4.58	4.76
130	385002	3.36	3.53
131	90471	4.73	4.37
132	76039	1.91	3.48
133	79345	3.92	3.86
134	1929733	5	5.18
135	77474	7.59	6.42
136	2008584	2.61	3.27

No.	CAS	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (exp.)	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (SVM)
137	59756604	7.18	4.53
138	3687136	4.74	4.70
139	1757182	6.14	6.29
140	6639301	5.42	5.21
141	103059	3.39	3.56
142	1080326	2.83	3.04
143	616728	4.39	4.40
144	2232088	3.73	4.16
145	115195	1.41	2.64
146	51285	4.29	4.06
147	13171216	3.48	4.87
148	4214793	2.06	3.42
149	872504	1.97	2.52
150	761659	3.25	3.64
151	5217470	1.65	3.97
152	3309680	5.93	5.49
153	106898	3.86	2.57
154	882337	6.3	5.38
155	13909734	3.02	2.89
156	1647161	5.68	5.60
157	102716	1.1	2.31
158	133062	6.18	6.17
159	88963397	4.73	4.63
160	106945	3.26	3.40
161	5395755	3.4	3.99
162	683727	2.73	2.95
163	330541	4.22	4.05
164	21725462	4.12	3.03

No.	CAS	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (exp.)	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (SVM)
165	70382	6.66	6.46
166	42454068	3.6	3.83
167	5835267	5.54	6.52
168	69770236	5.84	6.37
169	108941	2.2	2.87
170	955839	6.64	6.63
171	732116	4.64	5.76
172	123386	2.65	2.95
173	143168	5.38	5.39
174	79124768	5.95	5.86
175	13209159	5.99	5.71
176	26530201	6.18	4.76
177	118741	6.38	6.37
178	107073	3.18	2.37
179	106514	6.38	4.54
180	764136	4.47	4.68
181	29232937	5.09	4.26
182	314409	3.15	4.45
183	327980	6.17	6.25
184	58082	3.11	2.77
185	28689089	6.72	5.86
186	98828	4.28	4.45
187	35367385	5.86	5.54
188	55630	4.92	3.58
189	626437	4.2	4.01
190	141979	2.64	3.03
191	57147	3.88	0.59
192	756809	3.83	4.07



No.	CAS	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (exp.)	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (SVM)
193	51630581	7.92	6.85
194	61788327	5.67	7.06
195	609234	5.59	5.91
196	4655349	3.53	3.54
197	142961	3.61	3.80
198	50293	7.46	6.38
199	98033	3.46	3.55
200	96093	4.05	3.28
201	2032599	5.03	3.52
202	90131	4.85	4.85
203	80546	4.61	5.01
204	121733	3.92	3.99
205	7212444	5.19	5.37
206	109875	1.04	1.06
207	76448	7.21	7.52
208	79016	3.47	4.11
209	1689823	5.23	5.32
210	619807	3.1	3.44
211	78875	2.95	3.19
212	608731	6.37	5.79
213	631641	3.5	3.24
214	101202	6.54	6.37
215	17804352	5.12	3.93
216	126738	4.45	4.61
217	58138082	5.39	6.10
218	96139	3.49	3.24
219	96489713	8.2	6.57
220	78273	2.69	2.46

No.	CAS	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (exp.)	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (SVM)
221	2869343	6.48	6.25
222	27304138	8.21	7.49
223	143226	2.04	2.05
224	56382	5.09	5.18
225	62737	4.8	4.66
226	104676	2.09	4.14
227	141275	4.32	4.50
228	41198087	6.65	6.11
229	512561	1.3	2.97
230	140885	4.6	3.62
231	5600215	3.01	2.96
232	68359375	8.6	7.78
233	583539	4.77	4.66
234	6921295	2.65	3.25
235	123159	3.73	3.47
236	109999	1.52	2.33
237	1634044	2.12	2.24
238	525826	4.8	4.86
239	90595	5.52	4.66
240	72548	4.86	6.27
241	2447792	3.3	3.60
242	124049	3.18	3.19
243	253521	3.12	3.05
244	18172673	5.43	5.35
245	3383968	7.14	7.12
246	70124775	9.35	7.90
247	14548459	4.11	4.33
248	1962750	5.67	5.68

No.	CAS	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (exp.)	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (SVM)
249	98434345	3.58	4.30
250	118796	4.7	5.00
251	57055386	5.41	6.50
252	16079882	1.23	3.42
253	732263	6.63	6.48
254	141935	4.51	4.97
255	622402	1.69	1.73
256	75978	3.06	2.63
257	693163	4.4	3.79
258	593088	5.74	5.75
259	100970	0.45	3.04
260	5989275	5.28	5.02
261	499832	2.72	3.51
262	584849	3.02	4.97
263	115866	5.57	5.58
264	34723825	2.94	3.00
265	623256	6.65	4.35
266	120218	3.87	4.25
267	1929824	4.37	4.96
268	95498	4.23	4.22
269	64675	3.21	3.65
270	3689245	6.26	5.48
271	2212671	3.84	4.01
272	75047	2.3	1.42
273	88722	3.57	3.83
274	105602	1.91	2.67
275	111251	4.68	4.41
276	206440	7.35	5.98

No.	CAS	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (exp.)	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (SVM)
277	111411	2.16	1.71
278	628762	3.75	3.74
279	112276	0.34	1.36
280	615656	3.6	3.57
281	620882	4.91	4.04
282	76222	3.14	3.39
283	92693	4.44	4.66
284	2499958	5.15	4.68
285	71410	2.27	2.70
286	2074671	3.64	3.21
287	102089	4.08	4.09
288	140669	6.43	5.94
289	111911	2.97	2.98
290	18292972	6.28	6.27
291	110065	5.12	4.72
292	2176627	5.73	5.72
293	693652	4.7	4.73
294	4839467	1.06	3.12
295	107197	4.56	3.07
296	37680652	6.88	5.94
297	79209	2.32	2.32
298	79061	2.6	3.03
299	836306	4.95	4.93
300	71556	3.45	3.44
301	768945	3.78	3.25
302	107108	2.28	2.07
303	106423	4.08	4.04
304	822866	3.92	4.01

No.	CAS	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (exp.)	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (SVM)
305	42087809	3.89	4.24
306	67685	0.36	2.36
307	589093	3.57	3.98
308	141435	1.47	1.77
309	97881	4.11	4.12
310	66332965	4.83	4.69
311	2016571	5.18	4.92
312	115322	5.79	6.46
313	496117	3.93	4.24
314	88697	4.21	3.93
315	108430	3.91	3.74
316	109217	4.1	4.05
317	120616	4.13	3.66
318	3066715	5.02	4.14
319	77714	0.89	2.52
320	64197	3.13	2.16
321	29553262	2.44	2.27
322	81196	5.38	5.56
323	78922	1.31	2.06
324	606202	3.99	4.44
325	102772	4.86	4.25
326	29091052	5.35	5.27
327	78900	1.87	1.86
328	120627	5.64	5.40
329	88302	4.36	4.11
330	709988	4.4	4.49
331	105533	4.04	3.38
332	27458942	4.4	4.18

No.	CAS	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (exp.)	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (SVM)
333	115902	3.85	4.47
334	30030252	5.69	4.50
335	127004	2.59	2.26
336	542756	5.67	3.71
337	957517	6.7	3.99
338	111773	1.32	1.36
339	95169	3.33	3.62
340	124174	3.42	3.23
341	112129	5.06	4.98
342	78966	1.47	1.61
343	85687	5.12	5.88
344	50317	4.42	4.51
345	2455245	3.69	3.55
346	937202	4.21	4.12
347	4170303	4.86	3.56
348	110623	3.83	3.31
349	1746232	5.52	5.51
350	58275	6.2	4.08
351	99036	2.55	3.18
352	62759	1.9	1.61
353	598787	2.93	2.65
354	78795	2.93	4.02
355	115208	2.7	3.32
356	1740198	5.16	6.97
357	514103	5.1	6.35
358	497370	2.69	2.83
359	95545	3.39	2.84
360	96059	5.11	4.12

No.	CAS	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (exp.)	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (SVM)
361	97029	4.08	4.16
362	944229	5.35	5.76
363	4916578	3.09	3.51
364	598743	2.49	2.35
365	94622	4.56	4.85
366	4460860	3.6	3.37
367	111706	3.53	3.48
368	110883	1.18	1.17
369	107120	1.56	2.77
370	818724	5.49	3.53
371	83329	4.95	4.94
372	2163793	3.84	3.81
373	109659	3.57	3.58
374	464459	3.39	3.83
375	96220	1.75	3.00
376	91236	2.9	3.56
377	924414	3.41	3.58
378	105759	5.56	4.99
379	330938	5.26	5.54
380	2051607	4.67	5.34
381	610413	4.33	4.34
382	91576	4.82	4.83
383	109977	2.5	3.04
384	22037974	4.38	4.55
385	6485558	2.47	2.03
386	67630	0.84	1.53
387	111717	3.98	3.90
388	55406536	6.15	4.20

No.	CAS	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (exp.)	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (SVM)
389	123728	3.69	2.93
390	538681	4.94	5.51
391	75070	3.12	2.40
392	813785	3.85	3.16
393	140318	1.77	2.02
394	23060142	3.77	3.45
395	1861401	6.53	6.06
396	142825	4.65	4.98
397	10453868	7.74	7.49
398	105146	2.67	3.35
399	111273	3.02	3.01
400	122032	4.35	4.16
401	4412913	2.29	3.21
402	124221	6.26	5.80
403	34274049	3.3	2.84
404	79958	5.44	6.37
405	7307553	5.91	5.39
406	98011	3.66	3.24
407	90028	4.73	3.56
408	87616	4.89	4.98
409	24544045	4.03	4.21
410	629049	5.09	4.86
411	18368633	2.74	3.35
412	15972608	4.73	4.32
413	315184	4.12	3.78
414	298022	6.02	5.33
415	121879	3.96	3.72
416	629403	2.41	3.05



No.	CAS	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (exp.)	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (SVM)
417	6175491	5.19	5.39
418	88040	4.66	4.33
419	110827	4.27	3.89
420	75898	2.93	2.08
421	2973764	3.59	3.61
422	2402791	5.34	5.00
423	706149	3.98	3.79
424	108861	3.93	4.08
425	62533	3.08	2.98
426	700389	3.51	3.75
427	607818	4.66	4.12
428	100618	3.03	3.26
429	1689845	4.34	4.31
430	818611	4.38	3.31
431	14816183	5.01	5.50
432	107200	4.37	3.16
433	128370	5.78	5.91
434	22104627	4.18	2.57
435	105544	2.82	3.31
436	87172	4.73	4.79
437	333415	4.51	4.52
438	121448	3.37	2.66
439	39515510	5.63	4.97
440	107186	5.26	3.15
441	65337135	3.78	2.65
442	10202923	4.26	4.44
443	111422	1.35	1.55
444	603838	3.48	3.53

No.	CAS	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (exp.)	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (SVM)
445	122145	4.81	5.21
446	109853	2.16	1.57
447	107459	3.72	3.49
448	72435	7.61	5.91
449	83794	7.85	5.93
450	96413	1.8	2.57
451	771608	3.69	3.48
452	4253898	4.26	4.28
453	109773	5.07	2.66
454	763699	3.29	2.98
455	50066	2.68	4.03
456	56348391	4.84	4.97
457	95318	5.9	4.77
458	2370630	3.76	3.57
459	96297	2.01	3.05
460	470826	3.18	3.41
461	22726007	3.33	3.53
462	592461	3.61	4.62
463	2921882	6.04	6.21
464	874420	4.99	4.36
465	62555	2.44	2.74
466	91656	3.86	3.87
467	86577	4.28	4.29
468	4901513	5.75	5.40
469	653372	5.25	3.79
470	608935	6.01	6.03
471	108805	3.79	3.07
472	1965099	4.54	4.40

No.	CAS	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (exp.)	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (SVM)
473	298044	4.97	5.60
474	16245797	6.23	5.79
475	693981	2.46	2.69
476	108883	3.43	3.75
477	119346	3.65	3.28
478	75058	1.4	2.40
479	89781	3.92	4.03
480	700583	3.39	3.49
481	528290	5.45	4.25
482	464482	3.95	3.18
	Test set		
483	107211	0.07	1.60
484	111466	0.15	1.49
485	57556	0.24	1.61
486	64175	0.5	1.18
487	110805	0.53	1.59
488	111900	0.71	1.45
489	100798	0.9	2.38
490	67641	0.91	2.18
491	123911	0.93	1.19
492	107415	1.04	2.06
493	75650	1.06	1.78
494	126818	1.09	3.00
495	71238	1.12	1.96
496	149315	1.13	2.40
497	383631	1.15	2.86
498	51796	1.23	2.26
499	103764	1.31	1.81

No.	CAS	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (exp.)	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (SVM)
500	78933	1.35	2.61
501	15892236	1.59	2.01
502	71363	1.63	2.21
503	109013	1.64	1.76
504	109079	1.65	1.92
505	78831	1.72	2.18
506	111693	1.75	2.74
507	110736	1.78	1.58
508	693936	1.78	2.59
509	109762	1.79	1.79
510	280579	1.81	2.08
511	100378	1.82	2.34
512	112072	1.82	3.34
513	107879	1.84	2.77
514	554121	1.89	2.85
515	685916	1.89	2.72
516	77758	1.91	2.76
517	95807	1.93	2.78
518	109897	1.93	1.85
519	563804	2	2.55
520	109068	2.02	2.86
521	94757	2.05	4.20
522	627305	2.07	2.38
523	105599	2.08	2.05
524	584021	2.11	2.50
525	108203	2.11	2.48
526	127060	2.12	2.65
527	55185	2.12	2.64

No.	CAS	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (exp.)	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (SVM)
528	17584122	2.12	2.50
529	621421	2.13	3.15
530	138863	2.15	5.00
531	108930	2.15	2.55
532	100709	2.16	2.98
533	77747	2.18	2.70
534	30899195	2.21	2.68
535	5813649	2.26	2.46
536	55210	2.26	3.13
537	103902	2.27	2.94
538	108214	2.28	2.67
539	75310	2.28	1.75
540	108101	2.28	2.88
541	6636788	2.32	3.26
542	105373	2.36	3.04
543	108894	2.36	2.86
544	591786	2.37	3.16
545	100516	2.37	3.16
546	120070	2.39	3.19
547	20662844	2.4	2.53
548	100710	2.41	3.22
549	928961	2.42	3.40
550	13952846	2.43	2.15
551	109739	2.44	2.29
552	141913	2.47	2.34
553	88686	2.54	2.96
554	540885	2.55	2.87
555	142621	2.56	3.45

No.	CAS	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (exp.)	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (SVM)
556	109751	2.57	3.15
557	928972	2.57	3.33
558	6602320	2.57	3.38
559	626937	2.57	2.80
560	623370	2.57	2.65
561	141786	2.58	2.56
562	80626	2.59	3.34
563	122996	2.6	3.33
564	110587	2.69	2.82
565	75990	2.69	3.10
566	126114	2.73	2.89
567	100641	2.74	3.04
568	1482151	2.74	2.67
569	110190	2.75	3.11
570	868779	2.76	3.10
571	78591	2.78	3.66
572	16879020	2.78	3.35
573	108996	2.81	2.86
574	106490	2.83	3.06
575	600362	2.85	3.00
576	110123	2.86	3.25
577	1122549	2.86	2.81
578	96800	2.86	2.66
579	107062	2.86	3.10
580	98862	2.87	3.37
581	123546	2.87	2.77
582	15045439	2.88	3.24
583	107299	2.89	2.82

No.	CAS	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (exp.)	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (SVM)
584	110861	2.9	2.80
585	932161	2.9	3.05
586	108656	2.91	2.50
587	15128822	2.92	3.34
588	123115	2.93	3.55
589	110430	2.94	3.47
590	2859678	2.96	2.74
591	51235042	2.96	3.67
592	769288	2.98	3.48
593	5683330	2.98	2.79
594	1072975	2.99	3.27
595	88755	3	3.63
596	142289	3.01	3.10
597	70699	3.01	3.41
598	98953	3.01	3.59
599	100469	3.02	3.06
600	108010	3.04	1.54
601	150765	3.05	3.30
602	110009	3.05	3.14
603	150787	3.07	3.49
604	123251	3.09	3.55
605	2439772	3.1	3.05
606	127662	3.11	3.40
607	95534	3.12	3.14
608	109524	3.12	3.19
609	65452	3.13	3.37
610	625865	3.14	3.43
611	464493	3.14	3.31

No.	CAS	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (exp.)	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (SVM)
612	496162	3.17	3.67
613	110930	3.17	3.65
614	104905	3.17	3.34
615	112050	3.18	4.58
616	110656	3.21	2.74
617	100470	3.21	3.41
618	578541	3.21	3.38
619	79005	3.21	3.45
620	91225	3.22	3.50
621	589162	3.22	3.35
622	150196	3.23	3.29
623	109604	3.23	2.98
624	100663	3.24	3.47
625	134623	3.24	3.69
626	108463	3.25	3.12
627	111262	3.25	3.13
628	14548460	3.25	3.80
629	121335	3.26	3.36
630	75365	3.27	2.59
631	121697	3.28	3.49
632	121324	3.28	3.55
633	108394	3.29	3.40
634	927742	3.29	2.82
635	75912	3.33	1.76
636	99558	3.35	3.37
637	529204	3.36	3.59
638	945517	3.37	3.89
639	14321278	3.37	3.42



No.	CAS	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (exp.)	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (SVM)
640	552410	3.38	3.66
641	2117115	3.38	2.39
642	131113	3.39	3.62
643	619249	3.39	3.35
644	110565	3.39	3.50
645	96184	3.41	3.69
646	80524	3.42	2.80
647	529191	3.42	3.71
648	57432	3.42	3.89
649	102692	3.42	3.16
650	102272	3.44	3.78
651	587020	3.44	3.45
652	99990	3.44	3.78
653	99978	3.44	3.73
654	19549985	3.46	3.40
655	108952	3.46	3.25
656	88744	3.46	3.55
657	621089	3.46	3.90
658	107131	3.47	3.50
659	108441	3.47	3.12
660	506967	3.48	2.76
661	68111	3.49	2.84
662	100107	3.51	3.51
663	459596	3.51	3.52
664	108054	3.52	3.28
665	4798441	3.52	3.23
666	4920778	3.52	3.87
667	10293068	3.53	3.49

No.	CAS	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (exp.)	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (SVM)
668	91883	3.53	3.91
669	1129357	3.54	3.45
670	56235	3.55	3.91
671	111137	3.55	3.82
672	103833	3.55	3.38
673	368774	3.56	3.83
674	504609	3.56	4.27
675	106401	3.56	3.58
676	104870	3.56	3.57
677	71862027	3.56	3.66
678	2150472	3.57	3.59
679	2759286	3.57	3.47
680	100027	3.57	3.60
681	2362610	3.6	4.09
682	447609	3.61	3.93
683	106478	3.61	3.46
684	98884	3.61	3.37
685	123057	3.63	4.18
686	99081	3.63	3.77
687	107982	3.64	1.45
688	71432	3.65	3.52
689	576261	3.66	3.58
690	33693048	3.66	4.12
691	502567	3.66	4.24
692	104767	3.66	3.78
693	94097	3.67	3.51
694	573568	3.67	4.34
695	150685	3.68	3.54

No.	CAS	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (exp.)	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (SVM)
696	107755	3.7	3.15
697	350469	3.7	3.62
698	107471	3.7	3.99
699	2164172	3.71	3.89
700	111682	3.72	3.57
701	88733	3.73	3.97
702	5922601	3.73	3.52
703	10031820	3.73	3.79
704	56108124	3.75	3.79
705	614802	3.75	3.24
706	121142	3.75	4.31
707	95523	3.75	3.91
708	66251	3.76	3.51
709	98168	3.77	3.51
710	119324	3.77	3.49
711	10151	3.77	3.78
712	31502575	3.77	3.99
713	2028639	3.78	2.64
714	619727	3.78	3.34
715	393395	3.78	3.81
716	89623	3.79	3.70
717	100005	3.8	4.02
718	570241	3.8	3.71
719	578461	3.8	3.83
720	123864	3.81	3.29
721	95476	3.81	4.06
722	607001	3.81	4.55
723	500221	3.82	3.01

No.	CAS	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (exp.)	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (SVM)
724	106445	3.82	3.40
725	371404	3.82	3.17
726	108383	3.82	4.03
727	108907	3.82	3.93
728	3302101	3.83	4.11
729	97530	3.84	3.94
730	108418	3.84	4.22
731	554847	3.84	3.59
732	106230	3.84	4.48
733	84662	3.84	4.00
734	764012	3.84	2.73
735	1119400	3.85	3.31
736	616864	3.85	3.83
737	3944761	3.85	3.69
738	105679	3.87	3.60
739	5673074	3.88	3.66
740	95487	3.89	3.47
741	1891958	3.89	4.00
742	619501	3.89	3.80
743	108598	3.9	3.04
744	95658	3.9	3.59
745	618859	3.91	4.21
746	118616	3.92	4.11
747	613456	3.92	3.52
748	2216515	3.92	3.93
749	99525	3.92	3.37
750	5464711	3.93	4.55
751	271896	3.93	4.04

No.	CAS	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (exp.)	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (SVM)
752	96173	3.94	3.25
753	111308	3.94	3.25
754	1745819	3.95	3.97
755	91667	3.96	4.39
756	821556	3.97	4.16
757	498668	3.97	3.90
758	108429	3.98	3.43
759	111875	3.98	3.88
760	939231	3.98	4.02
761	6575093	4	4.05
762	100414	4.01	4.19
763	527606	4.02	3.91
764	552896	4.02	3.84
765	95012	4.02	3.43
766	100527	4.03	3.43
767	141286	4.05	3.72
768	95578	4.05	3.59
769	123079	4.07	3.74
770	120809	4.08	3.19
771	119619	4.09	4.56
772	645567	4.09	4.10
773	35572782	4.12	4.11
774	99887	4.13	3.58
775	83410	4.14	4.01
776	93890	4.14	3.91
777	94826	4.14	4.62
778	275514	4.15	4.40
779	104132	4.17	4.01

No.	CAS	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (exp.)	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (SVM)
780	2905693	4.17	4.31
781	83341	4.17	3.96
782	555168	4.18	3.75
783	6393426	4.18	4.31
784	760236	4.18	3.83
785	149304	4.19	4.24
786	95501	4.19	4.45
787	1126461	4.19	4.07
788	90120	4.2	4.86
789	2234164	4.21	4.23
790	70343065	4.21	4.41
791	123660	4.21	4.04
792	2416946	4.22	3.89
793	387451	4.23	3.90
794	583788	4.23	4.14
795	80433	4.24	6.34
796	56348404	4.25	4.38
797	94815	4.26	4.50
798	541731	4.26	4.48
799	3923522	4.27	4.29
800	59507	4.29	4.01
801	122349	4.31	3.68
802	91203	4.32	4.44
803	585342	4.32	4.19
804	106489	4.32	3.78
805	2626837	4.32	4.16
806	120832	4.32	4.14
807	95761	4.33	3.93

No.	CAS	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (exp.)	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (SVM)
808	106434	4.33	4.27
809	1484260	4.34	4.12
810	95512	4.35	3.43
811	108872	4.36	4.40
812	5372816	4.37	3.91
813	121755	4.37	5.21
814	114261	4.38	3.52
815	834128	4.38	4.22
816	99650	4.38	4.21
817	2051618	4.38	5.54
818	111864	4.4	3.97
819	100447	4.4	3.87
820	3452979	4.4	3.81
821	143088	4.4	4.37
822	100425	4.41	4.19
823	554007	4.41	3.98
824	99616	4.42	3.76
825	1126790	4.42	4.59
826	872311	4.42	4.04
827	1194656	4.42	4.14
828	590863	4.42	2.98
829	2243278	4.42	4.41
830	63252	4.45	4.00
831	90437	4.45	4.41
832	19406510	4.46	4.24
833	103651	4.46	4.59
834	98544	4.47	4.22
835	54576328	4.47	4.37

No.	CAS	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (exp.)	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (SVM)
836	1638228	4.47	4.49
837	298000	4.47	4.93
838	6203185	4.47	3.86
839	90153	4.49	3.98
840	88062	4.5	4.64
841	693549	4.51	4.58
842	142927	4.52	4.02
843	51218452	4.54	4.25
844	95738	4.54	4.76
845	1570656	4.54	4.40
846	6358641	4.54	3.42
847	17754904	4.56	4.38
848	5465656	4.56	4.29
849	5292455	4.56	4.26
850	831823	4.58	4.73
851	106241	4.59	4.36
852	104552	4.59	3.96
853	634935	4.59	4.67
854	999611	4.59	3.12
855	544401	4.61	4.72
856	106467	4.62	4.52
857	135193	4.62	3.95
858	94677	4.63	3.41
859	101848	4.63	5.33
860	67367	4.63	4.90
861	2460493	4.64	4.14
862	99865	4.64	5.12
863	1912249	4.64	3.80



No.	CAS	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (exp.)	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (SVM)
864	122394	4.65	4.69
865	89838	4.67	4.18
866	6361213	4.68	4.35
867	133119	4.68	4.45
868	80057	4.69	4.79
869	102067	4.7	3.92
870	84833	4.71	4.33
871	141037	4.71	4.72
872	634673	4.73	4.58
873	108703	4.74	5.09
874	329715	4.74	4.25
875	95750	4.74	4.72
876	89985	4.75	3.84
877	107142	4.75	3.13
878	108361	4.78	4.73
879	120821	4.78	5.03
880	106638	4.79	3.91
881	148538	4.8	3.46
882	7383199	4.8	3.28
883	80466	4.8	4.67
884	39905572	4.81	4.67
885	112301	4.82	4.81
886	112209	4.82	4.46
887	104518	4.83	5.05
888	708769	4.83	3.60
889	105997	4.85	4.90
890	616739	4.86	4.47
891	95954	4.86	4.72

No.	CAS	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (exp.)	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (SVM)
892	118967	4.88	6.01
893	260946	4.89	4.58
894	92524	4.9	5.09
895	5267276	4.91	4.43
896	61096842	4.95	5.18
897	935955	4.95	5.32
898	2138229	4.96	3.51
899	446526	4.96	3.54
900	110407	4.98	4.89
901	95829	4.99	4.00
902	109648	4.99	3.54
903	636306	5	4.60
904	602017	5.01	4.31
905	13608872	5.05	4.77
906	534521	5.05	4.26
907	610399	5.08	4.26
908	91941	5.11	4.72
909	619158	5.15	4.25
910	4117140	5.16	4.48
911	93914	5.17	3.53
912	14938353	5.18	4.98
913	1761611	5.19	4.18
914	112425	5.22	5.28
915	118558	5.26	5.13
916	80068	5.26	5.16
917	6846500	5.27	5.04
918	112538	5.27	5.71
919	454897	5.28	3.87

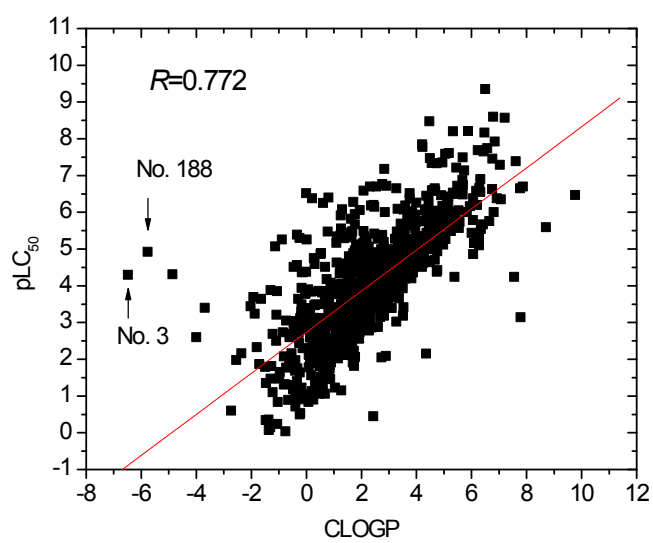
No.	CAS	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (exp.)	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (SVM)
920	2536314	5.28	4.48
921	106376	5.28	4.77
922	634662	5.29	5.54
923	1198556	5.29	5.17
924	99354	5.29	5.97
925	86748	5.29	4.76
926	3428248	5.3	3.96
927	471772	5.31	6.32
928	635938	5.31	4.07
929	56207397	5.34	4.42
930	116063	5.34	3.66
931	58902	5.35	5.32
932	22936863	5.38	3.94
933	10222012	5.39	3.43
934	100254	5.39	4.17
935	634902	5.39	5.56
936	1563662	5.42	3.87
937	29590429	5.44	5.19
938	84742	5.45	5.57
939	111319	5.47	4.09
940	3126907	5.49	5.77
941	88857	5.54	4.98
942	2437254	5.63	5.69
943	1825214	5.63	6.12
944	4097498	5.65	4.91
945	23184669	5.65	5.40
946	55792615	5.77	5.43
947	1871574	5.82	3.77

No.	CAS	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (exp.)	pLC <sub>50</sub> /mol L <sup>-1</sup> (SVM)
948	95943	5.83	5.54
949	97234	5.94	5.54
950	299843	6.02	6.05
951	87865	6.04	6.02
952	3558698	6.04	5.99
953	123319	6.4	3.15
954	87683	6.46	6.25
955	1582098	6.5	5.98
956	58899	6.52	5.79
957	57749	6.55	6.95
958	37529309	6.58	6.64
959	1204213	6.59	3.74
960	3698837	6.77	5.64
961	13071799	7.34	5.64
962	120127	7.47	5.58
963	1484135	7.78	5.58

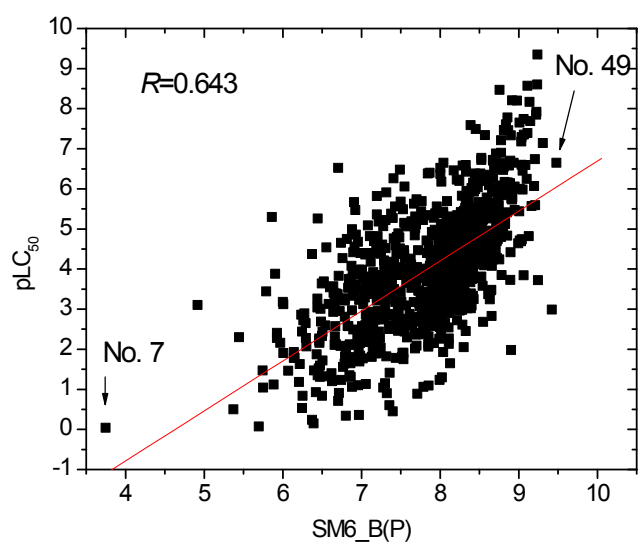
**Table S2**

Definitions of molecular descriptors selected.

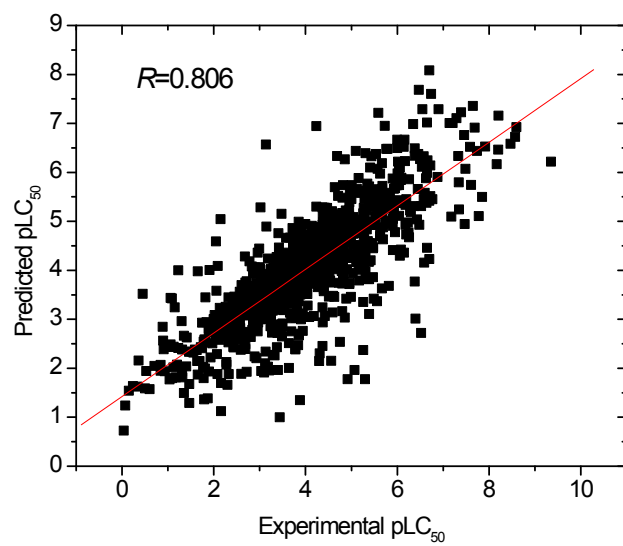
Descriptor	Definition
CLOGP	Octanol–water partition coefficient from CLogP Driver (molecular properties)
SM6_B(P)	Spectral moment of order 6 from Burden matrix weighted by polarizability (2D matrix-based descriptors)
NDB	Number of double bonds (constitutional indices)
nHM	Number of heavy atoms (constitutional indices)
SPMAD_EA	Spectral mean absolute deviation from edge adjacency mat. (Edge adjacency indices)
MOR10E	Signal 10/weighted by Sanderson electronegativity (3D-MoRSE descriptors)
B10[C-N]	Presence/absence of C - N at topological distance 10 (2D atom pairs)
MLOGP	Moriguchi octanol-water partition coefficient (molecular properties)



**Fig. S1.** Plot of the descriptor CLOGP versus pLC<sub>50</sub>



**Fig. S2.** Plot of the descriptor SM6\_B(P) versus pLC<sub>50</sub>



**Fig.S3.** Plot of experimental versus predicted  $pEC_{10}$  with Eq. (12).