Electronic Supplementary Material (ESI) for Environmental Science: Nano.

Table S1. Data set 1

CompNo	Metal oxides (MeOx) NPs	log(1/LC50)	Predicted log(1/LC50)
*1	ZnO	3.32	2.96
2	TiO_2	1.76	1.77
3	CoO	2.83	2.74
4	In_2O_3	2.92	2.70
*5	NiO	2.49	2.29
6	V_2O_3	2.24	2.53
*7	Y_2O_3	2.21	1.92
8	Al_2O_3	1.85	2.40
9	Bi_2O_3	2.5	2.76
*10	La_2O_3	2.87	2.27
11	Sb_2O_3	2.31	2.12
12	SiO_2	2.12	1.93
13	SnO_2	2.67	2.42
14	ZrO_2	2.02	2.39
15	Cr_2O_3	2.3	2.56
*16	Fe_2O_3	2.05	2.72
17	WO_3	2.56	2.96
18	Mn_2O_3	2.64	1.77

*Represents test set compounds

Table S2. Data set 2

SL. No.	Metal oxide name
1.	Al_2O_3
2.	Bi_2O_3
3.	Mn_2O_3
4.	NiO
5.	TiO_2
6.	WO_3

7.	Y_2O_3
8.	ZnO
9.	ZrO_2
10.	Fe_2O_3
11.	In_2O_3
12.	La_2O_3
13.	Sb_2O_3
14.	SnO_2
15.	Cr_2O_3

Table S3. Details of the dataset 2.

No.	PMID	Material	Core Size	Hydrodynamic Size	Surface Charge	Assay Method	Cell Line	Dose	% Cell death	PChem score (Maximum score: 5)
1.	24983896	Al2O3	44	372.3	-20.2	CytoTox-Glo	HaCaT	50	5.1	4.75
2.	24983896	Al2O3	44	372.3	-20.2	CytoTox-Glo	HaCaT	100	18.4	4.75
3.	24983896	Al2O3	44	372.3	-20.2	CytoTox-Glo	HaCaT	150	20.6	4.75
4.	24983896	Al2O3	44	372.3	-20.2	CytoTox-Glo	HaCaT	200	26.5	4.75
5.	24983896	Al2O3	44	372.3	-20.2	CytoTox-Glo	HaCaT	250	28	4.75
6.	24983896	Al2O3	44	372.3	-20.2	CytoTox-Glo	HaCaT	500	30.5	4.75
7.	24983896	Al2O3	44	372.3	-20.2	CytoTox-Glo	HaCaT	750	35.5	4.75
8.	24983896	Al2O3	44	372.3	-20.2	CytoTox-Glo	HaCaT	1000	47.6	4.75
9.	24983896	Al2O3	44	372.3	-20.2	CytoTox-Glo	HaCaT	1500	50.1	4.75
10. *	24983896	Bi2O3	90	2029	-2.3	CytoTox-Glo	HaCaT	50	8.8	4.75
11.	24983896	Bi2O3	90	2029	-2.3	CytoTox-Glo	HaCaT	100	10.7	4.75
12.	24983896	Bi2O3	90	2029	-2.3	CytoTox-Glo	HaCaT	150	14.7	4.75
13.	24983896	Bi2O3	90	2029	-2.3	CytoTox-Glo	HaCaT	200	22.8	4.75
14. *	24983896	Bi2O3	90	2029	-2.3	CytoTox-Glo	HaCaT	250	30.8	4.75
15.	24983896	Bi2O3	90	2029	-2.3	CytoTox-Glo	HaCaT	500	37	4.75

16.	24983896	Bi2O3	90	2029	-2.3	CytoTox-Glo	HaCaT	750	36.7	4.75
17.	24983896	Bi2O3	90	2029	-2.3	CytoTox-Glo	HaCaT	1000	41.7	4.75
18. *	24983896	Bi2O3	90	2029	-2.3	CytoTox-Glo	HaCaT	1500	50.1	4.75
19.	24983896	Cr2O3	60	616.8	5.7	CytoTox-Glo	HaCaT	50	4.8	4.75
20.	24983896	Cr2O3	60	616.8	5.7	CytoTox-Glo	HaCaT	100	6.6	4.75
21.	24983896	Cr2O3	60	616.8	5.7	CytoTox-Glo	HaCaT	150	10.4	4.75
22. *	24983896	Cr2O3	60	616.8	5.7	CytoTox-Glo	HaCaT	200	13.2	4.75
23.	24983896	Cr2O3	60	616.8	5.7	CytoTox-Glo	HaCaT	250	27.1	4.75
24. *	24983896	Cr2O3	60	616.8	5.7	CytoTox-Glo	HaCaT	500	29.6	4.75
25.	24983896	Cr2O3	60	616.8	5.7	CytoTox-Glo	HaCaT	750	42	4.75
26.	24983896	Cr2O3	60	616.8	5.7	CytoTox-Glo	HaCaT	1000	71.2	4.75
27.	24983896	Cr2O3	60	616.8	5.7	CytoTox-Glo	HaCaT	1500	76.8	4.75
28.	24983896	Fe2O3	32	297.6	-18.1	CytoTox-Glo	HaCaT	50	7.6	4.75
29.	24983896	Fe2O3	32	297.6	-18.1	CytoTox-Glo	HaCaT	100	11.6	4.75
30.	24983896	Fe2O3	32	297.6	-18.1	CytoTox-Glo	HaCaT	150	13.2	4.75
31.	24983896	Fe2O3	32	297.6	-18.1	CytoTox-Glo	HaCaT	200	16.9	4.75
32. *	24983896	Fe2O3	32	297.6	-18.1	CytoTox-Glo	HaCaT	250	19	4.75
33.	24983896	Fe2O3	32	297.6	-18.1	CytoTox-Glo	HaCaT	500	21.8	4.75
34.	24983896	Fe2O3	32	297.6	-18.1	CytoTox-Glo	HaCaT	750	23.4	4.75
35. *	24983896	Fe2O3	32	297.6	-18.1	CytoTox-Glo	HaCaT	1000	26.8	4.75
36.	24983896	Fe2O3	32	297.6	-18.1	CytoTox-Glo	HaCaT	1500	50.7	4.75
37.	24983896	In2O3	29.8	224.3	-9.6	CytoTox-Glo	HaCaT	50	-2	4.75
38.	24983896	In2O3	29.8	224.3	-9.6	CytoTox-Glo	HaCaT	100	6.6	4.75
39.	24983896	In2O3	29.8	224.3	-9.6	CytoTox-Glo	HaCaT	250	41.4	4.75
40.	24983896	In2O3	29.8	224.3	-9.6	CytoTox-Glo	HaCaT	500	63.4	4.75
41. *	24983896	In2O3	29.8	224.3	-9.6	CytoTox-Glo	HaCaT	750	68.7	4.75
42. *	24983896	In2O3	29.8	224.3	-9.6	CytoTox-Glo	HaCaT	1000	71.2	4.75
43.	24983896	In2O3	29.8	224.3	-9.6	CytoTox-Glo	HaCaT	1500	72.7	4.75
44.	24983896	La2O3	45.6	672.9	-12.8	CytoTox-Glo	HaCaT	50	2	4.75
45.	24983896	La2O3	45.6	672.9	-12.8	CytoTox-Glo	HaCaT	100	0.7	4.75
46.	24983896	La2O3	45.6	672.9	-12.8	CytoTox-Glo	HaCaT	250	48.2	4.75
47. *	24983896	La2O3	45.6	672.9	-12.8	CytoTox-Glo	HaCaT	500	72.4	4.75

48.	24983896	La2O3	45.6	672.9	-12.8	CytoTox-Glo	HaCaT	750	65	4.75
49. *	24983896	La2O3	45.6	672.9	-12.8	CytoTox-Glo	HaCaT	1000	65	4.75
50. *	24983896	La2O3	45.6	672.9	-12.8	CytoTox-Glo	HaCaT	1500	80.8	4.75
51.	24983896	Mn2O3	29.8	291.1	-3	CytoTox-Glo	HaCaT	50	9.1	4.75
52.	24983896	Mn2O3	29.8	291.1	-3	CytoTox-Glo	HaCaT	100	17.5	4.75
53. *	24983896	Mn2O3	29.8	291.1	-3	CytoTox-Glo	HaCaT	150	29.6	4.75
54.	24983896	Mn2O3	29.8	291.1	-3	CytoTox-Glo	HaCaT	200	41.1	4.75
55.	24983896	Mn2O3	29.8	291.1	-3	CytoTox-Glo	HaCaT	250	44.5	4.75
56. *	24983896	Mn2O3	29.8	291.1	-3	CytoTox-Glo	HaCaT	500	49.1	4.75
57.	24983896	Mn2O3	29.8	291.1	-3	CytoTox-Glo	HaCaT	750	60.9	4.75
58.	24983896	Mn2O3	29.8	291.1	-3	CytoTox-Glo	HaCaT	1000	69.6	4.75
59.	24983896	Mn2O3	29.8	291.1	-3	CytoTox-Glo	HaCaT	1500	77	4.75
60.	24983896	NiO	20	223.5	-12.1	CytoTox-Glo	HaCaT	50	-1	4.75
61.	24983896	NiO	20	223.5	-12.1	CytoTox-Glo	HaCaT	100	-1	4.75
62.	24983896	NiO	20	223.5	-12.1	CytoTox-Glo	HaCaT	250	46.3	4.75
63. *	24983896	NiO	20	223.5	-12.1	CytoTox-Glo	HaCaT	500	81.4	4.75
64.	24983896	NiO	20	223.5	-12.1	CytoTox-Glo	HaCaT	750	83.9	4.75
65. *	24983896	NiO	20	223.5	-12.1	CytoTox-Glo	HaCaT	1000	84.8	4.75
66.	24983896	NiO	20	223.5	-12.1	CytoTox-Glo	HaCaT	1500	86.4	4.75
67. *	24983896	Sb2O3	150	640.3	-13.3	CytoTox-Glo	HaCaT	50	6.9	4.75
68.	24983896	Sb2O3	150	640.3	-13.3	CytoTox-Glo	HaCaT	100	11.6	4.75
69.	24983896	Sb2O3	150	640.3	-13.3	CytoTox-Glo	HaCaT	150	15.3	4.75
70.	24983896	Sb2O3	150	640.3	-13.3	CytoTox-Glo	HaCaT	200	23.1	4.75
71. *	24983896	Sb2O3	150	640.3	-13.3	CytoTox-Glo	HaCaT	250	26.2	4.75
72.	24983896	Sb2O3	150	640.3	-13.3	CytoTox-Glo	HaCaT	500	32.1	4.75
73.	24983896	Sb2O3	150	640.3	-13.3	CytoTox-Glo	HaCaT	750	34.6	4.75
74.	24983896	Sb2O3	150	640.3	-13.3	CytoTox-Glo	HaCaT	1000	42.3	4.75
75.	24983896	Sb2O3	150	640.3	-13.3	CytoTox-Glo	HaCaT	1500	53.5	4.75
76.	24983896	SnO2	46.1	264.9	-10.5	CytoTox-Glo	HaCaT	50	8.2	4.75
77.	24983896	SnO2	46.1	264.9	-10.5	CytoTox-Glo	HaCaT	100	13.2	4.75
78. *	24983896	SnO2	46.1	264.9	-10.5	CytoTox-Glo	HaCaT	250	50.1	4.75
79.	24983896	SnO2	46.1	264.9	-10.5	CytoTox-Glo	HaCaT	500	56	4.75

80.	24983896	SnO2	46.1	264.9	-10.5	CytoTox-Glo	HaCaT	750	65.6	4.75
81. *	24983896	SnO2	46.1	264.9	-10.5	CytoTox-Glo	HaCaT	1000	70.8	4.75
82.	24983896	SnO2	46.1	264.9	-10.5	CytoTox-Glo	HaCaT	1500	82	4.75
83.	24983896	TiO2	42.3	1307	-9.6	CytoTox-Glo	HaCaT	50	20.3	4.75
84.	24983896	TiO2	42.3	1307	-9.6	CytoTox-Glo	HaCaT	100	17.5	4.75
85.	24983896	TiO2	42.3	1307	-9.6	CytoTox-Glo	HaCaT	250	33.9	4.75
86.	24983896	TiO2	42.3	1307	-9.6	CytoTox-Glo	HaCaT	500	34.2	4.75
87.	24983896	TiO2	42.3	1307	-9.6	CytoTox-Glo	HaCaT	750	38.6	4.75
88. *	24983896	TiO2	42.3	1307	-9.6	CytoTox-Glo	HaCaT	1000	39.2	4.75
89.	24983896	TiO2	42.3	1307	-9.6	CytoTox-Glo	HaCaT	1500	59.7	4.75
90.	24983896	WO3	50	179.6	-9.1	CytoTox-Glo	HaCaT	50	-6	4.75
91.	24983896	WO3	50	179.6	-9.1	CytoTox-Glo	HaCaT	100	-4	4.75
92.	24983896	WO3	50	179.6	-9.1	CytoTox-Glo	HaCaT	250	33.9	4.75
93. *	24983896	WO3	50	179.6	-9.1	CytoTox-Glo	HaCaT	500	47.9	4.75
94.	24983896	WO3	50	179.6	-9.1	CytoTox-Glo	HaCaT	750	48.5	4.75
95. *	24983896	WO3	50	179.6	-9.1	CytoTox-Glo	HaCaT	1000	50.7	4.75
96.	24983896	WO3	50	179.6	-9.1	CytoTox-Glo	HaCaT	1500	61.5	4.75
97.	24983896	Y2O3	38	1222.9	-10.7	CytoTox-Glo	HaCaT	50	-1	4.75
98.	24983896	Y2O3	38	1222.9	-10.7	CytoTox-Glo	HaCaT	100	3.5	4.75
99.	24983896	Y2O3	38	1222.9	-10.7	CytoTox-Glo	HaCaT	250	31.8	4.75
100.	24983896	Y2O3	38	1222.9	-10.7	CytoTox-Glo	HaCaT	500	37.7	4.75
101.	24983896	Y2O3	38	1222.9	-10.7	CytoTox-Glo	HaCaT	750	42	4.75
102.	24983896	Y2O3	38	1222.9	-10.7	CytoTox-Glo	HaCaT	1000	42.6	4.75
103.	24983896	Y2O3	38	1222.9	-10.7	CytoTox-Glo	HaCaT	1500	54.4	4.75
104.	24983896	ZnO	71	188.9	-10.8	CytoTox-Glo	HaCaT	50	66.2	4.75
105.	24983896	ZnO	71	188.9	-10.8	CytoTox-Glo	HaCaT	100	73.3	4.75
106.	24983896	ZnO	71	188.9	-10.8	CytoTox-Glo	HaCaT	250	87.9	4.75
107.	24983896	ZnO	71	188.9	-10.8	CytoTox-Glo	HaCaT	500	92.6	4.75
108.	24983896	ZnO	71	188.9	-10.8	CytoTox-Glo	HaCaT	750	98.1	4.75
109.	24983896	ZnO	71	188.9	-10.8	CytoTox-Glo	HaCaT	1000	99.07	4.75
110.	24983896	ZnO	71	188.9	-10.8	CytoTox-Glo	HaCaT	1500	100	4.75
111.	24983896	ZrO2	46.7	661.4	-8.5	CytoTox-Glo	HaCaT	50	2.9	4.75

112.	24983896	ZrO2	46.7	661.4	-8.5	CytoTox-Glo	HaCaT	100	6.9	4.75
113.	24983896	ZrO2	46.7	661.4	-8.5	CytoTox-Glo	HaCaT	250	26.5	4.75
114.	24983896	ZrO2	46.7	661.4	-8.5	CytoTox-Glo	HaCaT	500	31.8	4.75
115.	24983896	ZrO2	46.7	661.4	-8.5	CytoTox-Glo	HaCaT	750	33.9	4.75
116.	24983896	ZrO2	46.7	661.4	-8.5	CytoTox-Glo	HaCaT	1000	51.6	4.75
117.	24983896	ZrO2	46.7	661.4	-8.5	CytoTox-Glo	HaCaT	1500	57.5	4.75

*Represent test set data points