

Table S1. The CoMFA and CoMSIA molecular descriptors used in this study.

Cpd.	IC ₅₀ (nM)	MIC ₉₀ (μM)	CoMFA				CoMSIA		
			Steric	Electrostatic	Steric	Electrostatic	Hydrophobic	Hydrogen donor	Hydrogen acceptor
1	0.034	8.00	89.00	178.00	7.21	1.18	5.32	1.36	3.74
2*	0.005	0.50	95.00	190.00	7.38	1.27	5.69	1.45	4.44
3	0.012	3.00	83.00	166.00	6.85	1.17	5.43	1.71	3.91
4	0.046	4.00	95.00	190.00	7.23	1.25	5.53	1.40	3.94
5	0.021	15.60	92.00	184.00	7.43	1.19	5.49	1.37	3.92
6	0.014	4.00	99.00	198.00	7.43	1.25	5.63	1.37	4.68
7*	0.022	4.00	101.00	202.00	7.77	1.32	5.49	1.38	4.42
8	0.045	4.00	99.00	198.00	7.75	1.24	5.80	1.37	4.50
9	0.040	4.00	100.00	200.00	7.73	1.18	5.61	1.38	3.73
10	0.042	16.00	107.00	214.00	7.86	1.29	6.67	1.41	3.88
11*	0.009	2.00	106.00	212.00	7.67	1.23	6.11	1.39	3.91
12	0.035	3.00	106.00	213.00	7.90	3.37	5.95	1.40	3.90
13	0.112	1.00	114.00	228.00	8.16	1.26	6.40	1.54	4.47
14	0.025	1.00	109.00	218.00	7.79	1.25	5.76	1.38	3.87
15	0.018	16.00	99.00	198.00	7.39	1.29	5.31	1.39	4.03
16	0.009	8.00	97.00	194.00	7.38	1.29	5.35	1.40	4.47
17	0.003	4.00	97.00	194.00	7.57	1.27	5.29	1.40	4.35
18	0.032	4.00	107.00	214.00	7.81	1.33	5.55	1.38	4.07
19	0.005	1.00	97.00	194.00	7.41	1.23	5.57	1.39	4.14
20	0.021	1.50	100.00	200.00	7.62	1.21	5.65	1.36	3.74
21	0.015	1.00	96.00	192.00	7.45	1.27	5.62	1.38	4.51
22	0.003	0.05	104.00	208.00	7.59	1.33	5.82	1.37	5.10
23	0.004	0.50	86.00	172.00	7.06	1.17	5.50	1.68	3.90
24	0.002	0.20	119.00	238.00	8.04	2.91	5.71	1.40	3.86
25	0.004	0.50	98.00	196.00	7.70	1.27	6.92	1.37	4.39
26	0.004	0.50	110.00	220.00	8.02	1.24	5.84	1.38	4.00
27	0.003	1.00	95.00	190.00	7.49	1.19	5.73	1.47	4.20
28	0.002	0.70	105.00	210.00	7.80	1.21	5.62	1.38	4.13
29	0.005	0.70	101.00	202.00	7.77	1.26	5.77	1.40	4.52
30	0.029	1.00	99.00	198.00	7.41	1.33	5.92	1.39	4.53
31*	0.003	1.50	113.00	226.00	8.02	1.22	6.22	1.42	4.44
32	0.018	2.00	109.00	218.00	7.75	1.23	5.65	1.39	4.54
33	0.007	2.00	110.00	220.00	8.00	1.35	5.90	1.36	4.36
34	0.008	2.00	99.00	198.00	7.70	1.29	5.92	1.38	4.49

*test set