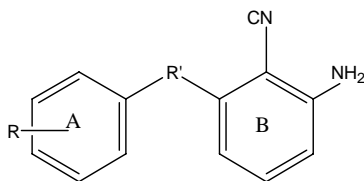


Octanol/water partition coefficient (logP), topological indices (χ , J) and E-state indices (E_{NH_2} , E_{S} , E_{SO} , E_{SO_2} , E_{CH_3} , E_{OCH_3} , E_{TCN} , E_{Cl} , E_{Br}) of AASBN analogs for training set.



S.No.	R	R'	logP	χ	J	E_{NH_2}	E_{S}	E_{SO}	E_{SO_2}	E_{TCN}	E_{CH_3}	E_{Cl}	E_{Br}
1.	H	S	3.37	8.720	1.919	5.750	1.550	0.000	0.000	11.172	0.000	0.000	0.000
2.	2-OCH ₃	S	3.24	9.668	1.983	5.789	1.477	0.000	0.000	11.264	0.000	0.000	0.000
3.	3-OCH ₃	S	3.24	9.651	1.923	5.781	1.500	0.000	0.000	11.246	0.000	0.000	0.000
4.	4-OCH ₃	S	3.24	9.651	1.872	5.775	1.514	0.000	0.000	11.232	0.000	0.000	0.000
5.	2-CH ₃	S	3.85	9.130	1.965	5.788	1.577	0.000	0.000	11.261	2.056	0.000	0.000
6.	3-CH ₃	S	3.85	9.113	1.931	5.780	1.565	0.000	0.000	11.241	2.050	0.000	0.000
7.	2-Cl	S	3.93	9.130	1.965	5.755	1.445	0.000	0.000	11.185	0.000	6.074	0.000
8.	3-Cl	S	3.93	9.113	1.931	5.754	1.480	0.000	0.000	11.182	0.000	5.913	0.000
9.	4-Cl	S	3.93	9.113	1.901	5.753	1.500	0.000	0.000	11.181	0.000	5.817	0.000
10.	2-Br	S	4.20	9.130	1.965	5.776	1.530	0.000	0.000	11.234	0.000	0.000	3.484
11.	3-Br	S	4.20	9.113	1.931	5.770	1.535	0.000	0.000	11.220	0.000	0.000	3.423
12.	4-Br	S	4.20	9.113	1.907	5.766	1.538	0.000	0.000	11.211	0.000	0.000	3.389
13.	3-F	S	3.53	9.113	1.931	5.706	1.325	0.000	0.000	11.074	0.000	0.000	0.000
14.	2-CN	S	3.40	9.668	1.983	5.755	1.379	0.000	0.000	11.188	0.000	0.000	0.000
15.	3-CN	S	3.40	9.651	1.923	5.753	1.429	0.000	0.000	11.184	0.000	0.000	0.000
16.	4-CN	S	3.40	9.651	1.872	5.752	1.460	0.000	0.000	11.182	0.000	0.000	0.000
17.	3-CF ₃	S	4.29	10.325	1.960	5.669	1.081	0.000	0.000	10.999	0.000	0.000	0.000
18.	2,5-Cl ₂	S	4.48	9.524	1.986	5.759	1.375	0.000	0.000	11.195	0.000	6.088	0.000
19.	3,5-Cl ₂	S	4.48	9.507	1.957	5.757	1.410	0.000	0.000	11.193	0.000	5.934	0.000

20.	3-Cl, 5-CH ₃	S	4.41	9.507	1.957	5.783	1.494	0.000	0.000	11.252	1.987	6.018	0.000
21.	3-OCH ₃ , 5-CH ₃	S	3.73	10.045	1.961	5.811	1.514	0.000	0.000	11.315	2.011	0.000	0.000
22.	3-OCH ₃ , 5-CF ₃	S	4.16	11.257	2.040	5.700	1.030	0.000	0.000	11.072	0.000	0.000	0.000
23.	2-OCH ₃	SO	1.98	10.096	2.095	5.730	0.000	11.075	0.000	11.119	0.000	0.000	0.000
24.	3-OCH ₃	SO	1.98	10.079	2.033	5.722	0.000	11.032	0.000	11.100	0.000	0.000	0.000
25.	4-OCH ₃	SO	1.98	10.079	1.979	5.716	0.000	11.005	0.000	11.087	0.000	0.000	0.000
26.	2-CH ₃	SO	2.60	9.558	2.077	5.729	0.000	11.121	0.000	11.116	1.894	0.000	0.000
27.	3-CH ₃	SO	2.60	9.541	2.041	5.721	0.000	11.054	0.000	11.096	1.936	0.000	0.000
28.	4-CH ₃	SO	2.60	9.541	2.010	5.715	0.000	11.015	0.000	11.083	1.966	0.000	0.000
29.	2-Br	SO	2.94	9.558	2.077	5.717	0.000	11.044	0.000	11.089	0.000	0.000	3.352
30.	3-Br	SO	2.94	9.541	2.041	5.711	0.000	11.003	0.000	11.075	0.000	0.000	3.329
31.	4-Br	SO	2.94	9.541	2.010	5.707	0.000	10.978	0.000	11.066	0.000	0.000	3.319
32.	2-CN	SO	2.14	10.096	2.095	5.696	0.000	10.906	0.000	11.043	0.000	0.000	0.000
33.	3-CN	SO	2.14	10.079	2.033	5.695	0.000	10.907	0.000	11.039	0.000	0.000	0.000
34.	4-CN	SO	2.14	10.079	1.979	5.693	0.000	10.909	0.000	11.036	0.000	0.000	0.000
35.	3-CF ₃	SO	3.03	10.752	2.066	5.610	0.000	10.478	0.000	10.854	0.000	0.000	0.000
36.	3-Cl, 5-CH ₃	SO	3.15	9.935	2.067	5.724	0.000	11.023	0.000	11.105	1.898	6.023	0.000
37.	3-OCH ₃ , 5-CF ₃	SO	2.90	11.684	2.144	5.636	0.000	10.571	0.000	10.915	0.000	0.000	0.000
38.	H	SO ₂	2.16	9.480	2.143	5.620	0.000	0.000	21.011	10.851	0.000	0.000	0.000
39.	2-OCH ₃	SO ₂	2.03	10.429	2.212	5.659	0.000	0.000	21.443	10.942	0.000	0.000	0.000
40.	3-OCH ₃	SO ₂	2.03	10.412	2.148	5.651	0.000	0.000	21.324	10.924	0.000	0.000	0.000
41.	4-OCH ₃	SO ₂	2.03	10.412	2.092	5.645	0.000	0.000	21.249	10.911	0.000	0.000	0.000
42.	2-CH ₃	SO ₂	2.64	9.891	2.194	5.658	0.000	0.000	21.422	10.939	1.714	0.000	0.000
43.	3-CH ₃	SO ₂	2.64	9.874	2.157	5.650	0.000	0.000	21.293	10.920	1.809	0.000	0.000
44.	4-CH ₃	SO ₂	2.64	9.874	2.125	5.644	0.000	0.000	21.217	10.906	1.873	0.000	0.000
45.	2-Cl	SO ₂	2.71	9.891	2.194	5.625	0.000	0.000	21.122	10.863	0.000	5.900	0.000
46.	3-Cl	SO ₂	2.71	9.874	2.157	5.624	0.000	0.000	21.092	10.861	0.000	5.789	0.000

47.	4-Cl	SO ₂	2.71	9.874	2.125	5.623	0.000	0.000	21.072	10.859	0.000	5.724	0.000
48.	2-Br	SO ₂	2.98	9.891	2.194	5.646	0.000	0.000	21.316	10.912	0.000	0.000	3.201
49.	3-Br	SO ₂	2.98	9.874	2.157	5.640	0.000	0.000	21.222	10.899	0.000	0.000	3.223
50.	4-Br	SO ₂	2.98	9.874	2.125	5.636	0.000	0.000	21.166	10.889	0.000	0.000	3.241
51.	2-F	SO ₂	2.31	9.891	2.194	5.564	0.000	0.000	20.567	10.723	0.000	0.000	0.000
52.	3-F	SO ₂	2.31	9.874	2.157	5.576	0.000	0.000	20.720	10.752	0.000	0.000	0.000
53.	2-CN	SO ₂	2.19	10.425	2.212	5.625	0.000	0.000	21.203	10.867	0.000	0.000	0.000
54.	3-CN	SO ₂	2.19	10.412	2.148	5.623	0.000	0.000	21.145	10.863	0.000	0.000	0.000
55.	4-CN	SO ₂	2.19	10.412	2.092	5.622	0.000	0.000	21.111	10.860	0.000	0.000	0.000
56.	3-CF ₃	SO ₂	3.08	11.086	2.177	5.539	0.000	0.000	20.652	10.677	0.000	0.000	0.000
57.	2,5-Cl ₂	SO ₂	3.27	10.285	2.215	5.629	0.000	0.000	21.202	10.873	0.000	5.914	0.000
58.	3,5-Cl ₂	SO ₂	3.27	10.268	2.183	5.627	0.000	0.000	21.172	10.871	0.000	5.810	0.000
59.	3-Br, 5-CH ₃	SO ₂	3.47	10.268	2.183	5.670	0.000	0.000	21.504	10.968	1.800	0.000	3.274
60.	3-Cl, 5-CH ₃	SO ₂	3.20	10.268	2.183	5.653	0.000	0.000	21.374	10.930	1.745	5.894	0.000
61.	3-OCH ₃ , 5-CH ₃	SO ₂	2.52	10.806	2.184	5.681	0.000	0.000	21.606	10.993	1.770	0.000	0.000
62.	3-OCH ₃ , 5-CF ₃	SO ₂	2.95	12.017	2.251	5.570	0.000	0.000	20.965	10.750	0.000	0.000	0.000
63.	3-OH, 5-CH ₃	SO ₂	2.25	10.806	2.184	9.729	0.000	0.000	17.684	3.428	7.763	0.000	0.000
64.	3-OCH ₂ CH ₃ , 5-CH ₃	SO ₂	2.85	11.306	2.167	5.703	0.000	0.000	21.774	11.042	1.784	0.000	0.000
65.	3-O (CH ₂) ₂ CH ₃ , 5-CH ₃	SO ₂	2.340	11.806	2.138	5.721	0.000	0.000	21.907	11.083	1.794	0.000	0.000
66.	1-Naphthyl	SO ₂	3.15	11.464	1.815	5.732	0.000	0.000	22.113	11.112	0.000	0.000	0.000
67.	2-Naphthyl	SO ₂	3.15	11.447	1.730	5.710	0.000	0.000	21.807	11.060	0.000	0.000	0.000