

Table S1. Combinations of different CoMSIA fields and their results for L1210^a

field(s)	r^2_{cv}	comp	SEP	r^2	SEE	F value	Contribution				
							S	E	H	D	A
S	0.317	5	0.506	0.649	0.358	20.367	1.00	-	-	-	-
E	0.135	5	0.586	0.564	0.399	14.213	-	1.00	-	-	-
H	0.414	5	0.511	0.751	0.301	33.217	-	-	1.00	-	-
D	-0.019	5	0.605	0.119	0.567	1.492	-	-	-	1.00	-
A	-0.056	1	0.629	0.146	0.539	10.084	-	-	-	-	1.00
SE	0.442	5	0.501	0.760	0.296	34.926	0.38	0.62	-	-	-
SH	0.457	5	0.488	0.795	0.274	42.599	0.38	-	0.62	-	-
SD	0.431	5	0.500	0.653	0.356	20.722	0.69	-	-	0.31	-
SA	0.310	5	0.532	0.769	0.290	36.679	0.57	-	-	-	0.43
EH	0.445	5	0.532	0.809	0.264	46.705	-	0.50	0.50	-	-
ED	0.017	4	0.612	0.514	0.417	14.793	-	0.68	-	0.32	-
EA	-0.028	5	0.619	0.593	0.385	16.048	-	0.69	-	-	0.31
HD	0.434	5	0.527	0.688	0.337	24.240	-	-	0.70	0.30	-
HA	0.224	5	0.573	0.756	0.298	34.105	-	-	0.70	-	0.30
DA	-0.028	1	0.634	0.120	0.547	8.076	-	-	-	0.67	0.33
SEH	0.494	5	0.504	0.826	0.252	52.055	0.25	0.41	0.34	-	-
SED	0.425	4	0.516	0.749	0.300	41.762	0.33	0.46	-	0.21	-
SEA	0.428	5	0.522	0.802	0.269	44.532	0.34	0.44	-	-	0.22
SHD	0.521	5	0.476	0.770	0.289	36.928	0.32	-	0.44	0.25	-
SHA	0.407	5	0.511	0.836	0.244	56.176	0.30	-	0.43	-	0.27
SDA	0.301	4	0.541	0.695	0.331	31.874	0.41	-	-	0.26	0.34
EHD	0.388	5	0.533	0.779	0.284	38.795	-	0.38	0.39	0.23	-
EHA	0.307	5	0.563	0.802	0.269	44.497	-	0.40	0.41	-	0.19

EDA	-0.051	1	0.631	0.198	0.522	14.550	-	0.41	-	0.39	0.20
HDA	0.246	5	0.556	0.718	0.320	28.074	-	-	0.48	0.26	0.26
SEHD	0.513	5	0.492	0.833	0.247	54.872	0.20	0.31	0.30	0.19	-
SEHA	0.439	5	0.524	0.835	0.245	55.806	0.21	0.32	0.30	-	0.17
SHDA	0.464	5	0.502	0.806	0.266	45.660	0.24	-	0.34	0.21	0.21
SEDA	0.358	4	0.535	0.759	0.294	44.139	0.35	0.35	-	0.18	0.18
EHDA	0.305	5	0.552	0.784	0.281	40.010	-	0.29	0.36	0.21	0.14
SEHDA	0.470	5	0.508	0.836	0.245	55.919	0.18	0.24	0.27	0.18	0.12

^aAbbreviations: S (steric); E (electrostatic); H (hydrophobic); D (H-bond donor); A (H-bond acceptor).

Table S2. Combinations of different CoMSIA fields and their results for Molt 4/C8 cell line^a

field(s)	r^2_{cv}	comp	SEP	r^2	SEE	F value	Contribution				
							S	E	H	D	A
S	0.503	5	0.512	0.775	0.319	38.615	1.00	-	-	-	-
E	0.115	5	0.669	0.525	0.464	12.375	-	1.00	-	-	-
H	0.496	5	0.534	0.768	0.324	37.056	-	-	1.00	-	-
D	-0.141	4	0.712	0.064	0.645	0.980	-	-	-	1.00	-
A	-0.135	3	0.718	0.191	0.595	4.578	-	-	-	-	1.00
SE	0.478	5	0.551	0.783	0.314	40.373	0.44	0.56	-	-	-
SH	0.523	5	0.508	0.828	0.280	53.737	0.41	-	0.59	-	-
SD	0.369	4	0.598	0.655	0.392	27.007	0.71	-	-	0.29	-
SA	0.488	5	0.559	0.803	0.299	45.564	0.64	-	-	-	0.36
EH	0.469	5	0.586	0.772	0.321	37.946	-	0.47	0.53	-	-
ED	-0.129	4	0.735	0.477	0.483	12.977	-	0.71	-	0.29	-
EA	-0.095	5	0.719	0.536	0.459	12.925	-	0.68	-	-	0.32
HD	0.396	5	0.599	0.712	0.361	27.656	-	-	0.75	0.26	-
HA	0.313	4	0.609	0.698	0.367	32.933	-	-	0.71	-	0.30
DA	-0.270	1	0.754	0.091	0.620	5.988	-	-	-	0.49	0.51
SEH	0.531	5	0.541	0.828	0.279	54.042	0.28	0.36	0.36	-	-
SED	0.380	4	0.608	0.742	0.339	41.029	0.38	0.44	-	0.18	-
SEA	0.470	5	0.588	0.811	0.293	48.025	0.37	0.40	-	-	0.22
SHD	0.486	5	0.540	0.787	0.310	41.458	0.32	-	0.44	0.24	-
SHA	0.481	5	0.548	0.833	0.275	55.758	0.35	-	0.42	-	0.23
SDA	0.296	5	0.637	0.750	0.337	33.599	0.52	-	-	0.16	0.32
EHD	0.286	5	0.632	0.750	0.337	33.570	-	0.34	0.45	0.21	-
EHA	0.330	5	0.633	0.755	0.333	34.540	-	0.37	0.45	-	0.18

EDA	-0.226	3	0.763	0.351	0.533	10.445	-	0.46	-	0.24	0.30
HDA	0.260	5	0.643	0.706	0.365	26.951	-	-	0.55	0.21	0.24
SEHD	0.477	5	0.571	0.823	0.283	51.981	0.22	0.26	0.32	0.19	-
SEHA	0.481	5	0.575	0.830	0.278	54.563	0.25	0.29	0.30	-	0.16
SHDA	0.465	5	0.576	0.806	0.296	46.666	0.27	-	0.37	0.19	0.18
SEDA	0.282	5	0.637	0.799	0.302	44.566	0.34	0.35	-	0.14	0.17
EHDA	0.203	5	0.661	0.752	0.335	33.971	-	0.28	0.40	0.18	0.14
SEHDA	0.416	5	0.600	0.826	0.281	53.047	0.20	0.22	0.29	0.16	0.12

^aAbbreviations: S (steric); E (electrostatic); H (hydrophobic); D (H-bond donor); A (H-bond acceptor).

Table S3. Combinations of different CoMSIA fields and their results for CEM cell line^a

field(s)	r^2_{cv}	comp	SEP	r^2	SEE	F value	Contribution				
							S	E	H	D	A
S	0.526	5	0.476	0.760	0.313	35.498	1.00	-	-	-	-
E	0.060	5	0.646	0.500	0.452	11.198	-	1.00	-	-	-
H	0.497	5	0.504	0.768	0.307	37.139	-	-	1.00	-	-
D	-0.178	3	0.686	0.047	0.613	0.956	-	-	-	1.00	-
A	-0.172	3	0.692	0.152	0.578	3.476	-	-	-	-	1.00
SE	0.515	4	0.512	0.791	0.292	42.337	0.46	0.54	-	-	-
SH	0.529	5	0.478	0.834	0.260	56.241	0.41	-	0.60	-	-
SD	0.355	3	0.571	0.581	0.406	26.832	0.67	-	-	0.33	-
SA	0.502	5	0.525	0.812	0.277	48.357	0.64	-	-	-	0.36
EH	0.464	5	0.556	0.772	0.305	37.856	-	0.44	0.56	-	-
ED	-0.235	5	0.718	0.510	0.447	11.636	-	0.71	-	0.29	-
EA	-0.124	5	0.694	0.513	0.446	11.800	-	0.70	-	-	0.30
HD	0.321	5	0.578	0.688	0.356	24.751	-	-	0.75	0.25	-
HA	0.339	5	0.577	0.719	0.339	28.603	-	-	0.72	-	0.28
DA	-0.337	3	0.740	0.158	0.576	3.631	-	-	-	0.35	0.65
SEH	0.560	5	0.503	0.841	0.254	59.366	0.28	0.34	0.37	-	-
SED	0.369	5	0.581	0.770	0.306	37.516	0.40	0.45	-	0.15	-
SEA	0.489	5	0.549	0.815	0.275	49.245	0.39	0.41	-	-	0.20
SHD	0.435	5	0.526	0.793	0.291	42.914	0.33	-	0.46	0.21	-
SHA	0.505	5	0.514	0.840	0.255	58.851	0.34	-	0.44	-	0.22
SDA	0.346	5	0.611	0.756	0.315	34.752	0.55	-	-	0.15	0.30
EHD	0.237	5	0.609	0.743	0.324	32.374	-	0.35	0.46	0.19	-
EHA	0.339	5	0.599	0.753	0.317	34.150	-	0.35	0.47	-	0.18

EDA	-0.251	3	0.744	0.332	0.513	9.601	-	0.50	-	0.25	0.25
HDA	0.263	5	0.619	0.700	0.350	26.191	-	-	0.57	0.20	0.23
SEHD	0.462	5	0.542	0.829	0.264	54.185	0.23	0.27	0.33	0.17	-
SEHA	0.496	5	0.540	0.834	0.260	56.447	0.25	0.28	0.33	-	0.14
SHDA	0.425	5	0.550	0.809	0.279	47.434	0.28	-	0.39	0.15	0.18
SEDA	0.313	5	0.607	0.797	0.288	43.845	0.36	0.37	-	0.12	0.15
EHDA	0.163	5	0.639	0.741	0.325	31.971	-	0.29	0.42	0.17	0.13
SEHDA	0.399	5	0.574	0.822	0.269	51.782	0.22	0.23	0.31	0.14	0.11

^aAbbreviations: S (steric); E (electrostatic); H (hydrophobic); D (H-bond donor); A (H-bond acceptor).