



QSAR modelling of peptidomimetic derivatives towards HKU4-CoV 3CLpro inhibitors against MERS-Cov

Imad Hammoudan ^{1,2}, Soumaya Matchi ¹, Mohamed Bakhouch ³, Salah Belaidi ^{4,5}, Samir Chtita ^{1,*}

Supplementary Materials

Table S1. Chemical descriptors calculated by ChemSketch.

N°	FW	C%	H%	N%	O%	S%	MV	Pa	RI	ST	D	Po	RDBE	NM
1	473,56	60,87	4,04	14,79	6,76	13,54	335,2	944,80	1,73	63,0	1,41	53,44	18	473
2	467,54	66,79	4,53	14,98	6,84	6,86	352,9	972,60	1,69	57,6	1,32	54,00	19	467
3	445,53	64,70	5,20	15,72	7,18	7,20	320,8	895,30	1,72	60,6	1,38	50,34	16	445
4	473,58	65,94	5,75	14,79	6,76	6,77	352,9	972,60	1,69	57,6	1,34	54,00	16	473
5	425,50	67,74	4,50	16,46	3,76	7,54	323,5	889,70	1,70	57,1	1,31	50,00	18	427
6	433,52	63,72	5,35	16,15	7,38	7,40	331,5	896,50	1,67	53,4	1,30	49,38	15	433
7	455,53	65,92	4,65	15,37	7,02	7,04	345,2	939,90	1,69	54,9	1,31	52,31	18	455
8	431,51	64,02	4,91	16,23	7,42	7,43	304,7	856,70	1,73	62,4	1,41	48,51	16	431
9	456,51	63,14	4,42	18,41	7,01	7,02	333,8	921,10	1,71	57,9	1,36	51,69	18	456
10	459,44	54,90	3,51	15,24	6,96	6,98	315,1	849,70	1,65	52,8	1,45	45,93	15	459
11	425,50	67,74	4,50	16,46	3,76	7,54	323,5	889,70	1,71	57,1	1,31	50,00	18	425
12	463,55	62,18	5,44	15,11	10,35	6,92	354,0	954,30	1,66	52,7	1,30	51,76	15	463
13	419,49	62,99	5,05	16,69	7,63	7,64	316,3	865,40	1,68	55,9	1,32	47,62	15	419
14	435,49	60,67	4,86	16,08	11,02	7,36	322,8	884,60	1,67	56,3	1,34	48,18	15	435
15	449,52	61,45	5,16	15,58	10,68	7,13	338,8	923,20	1,66	55,0	1,32	50,00	15	449
16	377,46	63,64	5,07	18,55	4,24	8,49	287,0	782,50	1,69	55,2	1,31	43,63	14	377
17	453,56	68,85	5,11	15,44	3,53	7,07	355,6	966,90	1,68	54,6	1,27	53,66	18	453
18	447,55	64,41	5,63	15,65	7,15	7,16	352,1	942,50	1,66	51,3	1,27	51,34	15	447
19	383,47	59,51	5,52	18,26	8,34	8,36	295,8	796,80	1,65	52,6	1,29	43,08	12	383
20	447,57	69,77	7,43	15,65	7,15	0	400,1	1009,8	1,58	40,5	1,11	52,83	13	447
21	578,64	68,50	5,40	14,52	8,30	0	453,6	1203,9	1,64	49,6	1,27	65,04	21	578
22	504,60	61,89	5,59	16,65	9,51	6,35	385,2	1037,6	1,66	52,6	1,30	56,47	16	504
23	482,57	72,18	6,27	11,61	9,95	0	398,0	1075,2	1,62	53,2	1,21	55,58	17	482
24	496,64	74,97	7,31	11,28	6,44	0	424,0	1129,7	1,69	50,3	1,17	59,35	16	496
25	530,64	63,38	5,70	14,84	9,05	6,04	389,6	1067,5	1,69	56,3	1,36	59,19	17	530
26	590,65	69,14	5,29	14,23	8,13	0	442,8	1202,8	1,67	54,4	1,33	66,00	22	590
27	488,55	68,84	5,98	11,47	9,82	0	386,8	1047,9	1,63	53,8	1,26	54,77	16	488
28	566,67	65,70	5,34	14,83	8,47	5,66	437,7	1183,4	1,67	53,4	1,29	64,67	20	566
29	482,62	74,66	7,10	11,61	6,63	0	407,4	1096,7	1,63	52,4	1,18	57,68	16	482
30	576,62	68,74	5,07	14,57	8,32	0	426,8	1164,1	1,68	55,3	1,35	64,18	22	576
31	434,53	69,10	6,96	12,89	11,05	0	372,7	978,1	1,58	47,4	1,16	49,01	13	434
32	503,33	52,50	4,41	8,35	9,54	0	334,8	911,6	1,64	54,9	1,50	47,60	13	503
33	557,62	60,31	4,88	17,58	11,48	5,75	400,7	1106,5	1,69	58,1	1,39	60,95	19	557
34	434,53	66,34	6,69	19,34	7,36	0	361,4	977,9	1,60	53,5	1,20	49,10	13	434
35	532,65	63,14	6,06	15,78	9,01	6,02	416,4	1107,3	1,65	50,0	1,27	60,05	16	532
36	518,63	62,53	5,83	16,20	9,25	6,18	401,2	1076,2	1,65	51,7	1,29	58,30	16	518
37	516,56	65,10	5,66	16,27	9,29	0	405,6	1065,5	1,63	47,6	1,27	56,98	17	516
38	464,58	62,05	6,07	18,09	6,89	6,90	348,8	949,6	1,67	54,9	1,33	52,10	14	464
39	433,54	72,03	7,21	9,69	11,07	0	379,5	984,0	1,57	45,2	1,14	49,77	13	433
40	532,66	63,14	6,06	15,78	9,01	6,02	416,4	1107,3	1,65	50,0	1,27	60,05	16	532
41	435,52	66,19	6,71	16,08	11,02	0	365,9	972,3	1,58	49,8	1,19	48,26	13	435

Table S2. Chemical descriptors calculated by Marvin Sketch.

N°	LogP	HLB	ME	PSA	VDWSA	VDWV	R
1	4,71	5,30	125,30	80,12	596,31	391,37	140,89
2	4,80	4,63	146,08	80,12	616,2	400,32	144,00
3	4,17	4,43	116,92	80,12	607,78	385,87	135,33
4	5,06	4,57	114,45	80,12	664,28	420,12	144,54
5	4,14	4,35	148,12	63,91	566,27	365,83	131,45
6	4,19	4,84	111,92	80,12	603,57	380,41	132,53
7	4,57	5,39	149,19	73,14	614,20	391,88	138,23
8	3,72	4,86	117,80	80,12	579,23	368,57	130,73
9	3,95	6,42	110,78	86,03	606,43	387,44	136,68
10	4,08	5,66	188,53	80,12	560,21	361,32	124,34
11	4,14	4,35	148,12	63,91	566,27	365,83	131,45
12	4,81	6,27	78,88	89,35	651,16	406,55	138,70
13	3,64	5,27	100,92	80,12	573,54	363,19	127,96
14	2,77	7,28	151,42	89,35	589,91	372,57	129,79
15	3,01	6,83	109,11	89,35	620,75	389,37	134,49
16	3,18	6,06	111,17	63,05	517,81	327,29	118,66
17	4,90	4,50	148,40	63,05	623,68	398,19	143,28
18	4,74	4,42	120,10	80,12	638,57	397,75	137,04
19	2,78	6,59	82,53	80,12	540,68	337,45	116,58
20	3,63	5,53	217,77	80,12	725,77	433,96	129,66
21	5,38	4,35	191,18	109,2	809,89	513,17	172,81
22	3,10	6,06	165,55	109,2	712,61	446,76	149,69
23	3,43	9,14	224,80	101,6	718,26	450,73	139,52
24	5,22	3,86	251,13	78,09	789,31	482,07	147,32
25	3,88	5,26	183,26	109,2	750,07	468,57	157,09
26	5,36	4,27	175,20	109,2	813,21	518,25	175,61
27	3,70	5,39	207,81	87,32	715,80	441,88	134,84
28	4,96	4,13	211,47	109,2	790,53	499,91	170,36
29	4,92	3,95	214,39	78,09	753,73	462,68	142,85
30	4,92	4,36	196,63	109,2	790,35	501,85	171,00
31	3,00	5,20	170,98	88,33	685,92	413,44	122,77
32	3,59	5,06	175,55	75,44	590,15	372,65	119,27
33	3,24	6,24	197,80	135,5	753,23	477,86	161,68
34	2,70	6,47	168,41	103,7	681,06	410,88	123,59
35	4,35	5,25	167,75	109,2	774,04	481,68	158,89
36	3,81	5,65	174,35	109,2	746,36	464,43	154,31
37	3,47	4,79	152,87	109,2	741,58	461,06	152,80
38	3,04	6,29	150,30	106,4	649,64	409,24	139,53
39	4,20	3,90	202,11	75,44	693,29	417,68	124,57
40	4,41	5,24	217,78	96,33	781,68	486,84	149,48
41	2,30	6,26	142,73	101,2	676,36	408,62	121,59

Table S3. Chemical descriptors calculated by ChemOffice.

N°	NHA	NHD	MR	PC	TD	WI	BI	MTI	NRB	NO
1	5	1	13,19	4,06	16	3455	1390984	25099	9	2
2	5	1	13,39	4,22	17	3783	1611666	28148	9	2
3	5	1	12,56	3,65	16	3160	1199934	23375	9	2
4	5	1	13,48	4,77	17	3783	1611666	28148	9	2
5	5	0	12,31	4,11	15	2816	1007753	21169	7	1
6	5	1	12,27	3,57	15	2868	1195675	21131	9	2
7	6	0	12,92	4,37	15	3332	1342552	24650	8	2
8	5	1	12,13	3,32	15	2867	1025400	21131	9	2
9	7	0	12,72	4,10	17	3432	1381129	25075	8	2
10	8	1	11,38	3,84	15	3133	1388575	20768	9	2
11	5	0	12,31	4,11	15	2816	1007753	21109	7	1
12	5	1	12,88	4,64	17	3542	1662739	25804	11	3
13	5	1	11,80	3,26	15	2605	1019886	19116	9	2
14	6	1	11,96	2,53	16	2896	1206571	20816	10	3
15	6	0	12,52	3,19	17	3218	1423970	23417	11	3
16	5	1	10,84	3,22	13	1882	603603	14035	7	1
17	5	1	13,35	4,66	17	3532	1420972	26718	9	1
18	5	1	12,73	3,97	15	3133	1388575	23162	9	2
19	5	1	10,58	1,98	13	1996	772351	14453	9	2
20	5	1	13,09	3,60	11	2915	1665329	22097	9	2
21	7	2	16,32	5,11	16	6351	4226668	46813	13	3
22	6	2	14,06	3,13	14	3838	2131163	27959	11	3
23	5	1	13,76	4,07	13	3818	2121684	28762	10	3
24	4	2	14,99	5,46	13	4041	2367281	31049	10	2
25	6	2	14,86	3,72	15	4527	2380519	33235	12	3
26	7	2	16,61	5,19	17	6812	4144928	50357	13	3
27	6	2	13,77	3,73	14	3787	2103216	27606	11	3
28	6	2	16,11	4,62	17	5720	3477127	42357	12	3
29	4	2	14,53	5,06	13	3754	2086022	28815	10	2
30	7	1	16,28	5,13	16	6350	3699448	47124	13	3
31	5	1	12,41	3,47	11	2683	1444075	20111	9	3
33	4	1	12,07	3,87	10	2011	894821	14562	8	3
35	8	2	15,11	3,41	16	5295	3070599	38019	12	4
36	6	2	12,42	2,70	11	2683	1444075	20102	9	2
37	6	2	14,99	3,97	15	4528	2789122	33235	12	3
38	5	2	14,74	3,85	15	4182	2446938	30812	12	3
39	7	2	14,27	3,63	14	4379	2698409	31756	11	3
40	6	2	13,10	2,89	12	2952	1389087	21790	9	2
41	4	1	12,62	4,58	11	2683	1444075	20313	9	2
42	6	2	14,99	3,97	15	4528	2789122	33235	12	3
43	6	1	12,20	2,52	11	2683	1444075	19927	9	3