

Supporting Information 2

Investigation of the Mutual Interactions of the Sodium Ion and Some 15-Crown-5 Ethers through an Experimentally Based QSPR Model and Quantum Mechanical Features

Mahmood Sanchooli*, Pouya Karimi, Fereshteh Shiri

Department of Chemistry, Faculty of Science, University of Zabol, Zabol, Iran

Corresponding author's e-mail: *sanchooli@uoz.ac.ir*

Table S2. The numerical values of the selected descriptors obtained for 65 isolated derivatives of 15C5. (Six descriptors which are selected by stepwise method presented only)

No.	LogK _{exp}	LUMO	Q ₀₁	Q _{C15}	Q _{C11}	Q _{C9}	Q _{C8}
1	3.27	0.174	-0.653	0.099	0.099	0.099	0.099
2	3.2	0.171	-0.675	0.196	0.096	0.098	0.092
3	3.2	0.171	-0.675	0.196	0.096	0.098	0.092
4	3.18	0.171	-0.675	0.196	0.096	0.098	0.092
5	3.1	0.168	-0.672	0.161	0.095	0.092	0.096
6	3.03	0.174	-0.677	0.161	0.092	0.094	0.096
7	3.12	0.170	-0.659	0.178	0.105	0.104	0.089
8	2.95	0.159	-0.703	0.216	0.094	0.095	0.099
9	3.18	0.175	-0.665	0.162	0.093	0.093	0.097
10	3.3	0.143	-0.684	0.232	0.105	0.103	0.090
11	2.97	0.146	-0.661	0.169	0.094	0.098	0.093
12	3.25	0.157	-0.658	0.180	0.105	0.104	0.089
13	2.89	0.157	-0.659	0.181	0.105	0.104	0.089
14	3	0.142	-0.659	0.180	0.105	0.104	0.089
15	3.04	0.151	-0.659	0.177	0.105	0.104	0.089
16	2.83	0.146	-0.679	0.161	0.092	0.095	0.096
17	2.72	0.144	-0.679	0.161	0.092	0.095	0.096
18	3.07	0.157	-0.658	0.180	0.105	0.094	0.095
19	3.04	0.155	-0.658	0.181	0.105	0.104	0.089
20	3.03	0.140	-0.682	0.180	0.109	0.100	0.091
21	3.02	0.152	-0.666	0.185	0.097	0.093	0.103
22	3.14	0.171	-0.678	0.159	0.093	0.094	0.096
23	3	0.170	-0.678	0.160	0.093	0.093	0.096
24	2.97	0.171	-0.650	0.131	0.105	0.103	0.093
25	3.05	0.170	-0.659	0.165	0.095	0.098	0.093
26	3.09	0.173	-0.664	0.162	0.093	0.093	0.096
27	3.22	0.173	-0.677	0.159	0.092	0.094	0.096
28	3.13	0.171	-0.665	0.185	0.105	0.104	0.092
29	3.23	0.171	-0.666	0.184	0.097	0.093	0.103
30	3.04	0.171	-0.666	0.184	0.097	0.090	0.103
31	3.09	0.172	-0.677	0.159	0.092	0.094	0.096
32	2.79	0.173	-0.664	0.200	0.092	0.095	0.096
33	2.82	0.172	-0.680	0.184	0.105	0.104	0.089
34	2.91	0.153	-0.686	0.181	0.097	0.093	0.103
35	2.92	0.173	-0.676	0.183	0.094	0.093	0.096
36	2.86	0.168	-0.702	0.279	0.090	0.092	0.103
37	3.88	0.186	-0.694	0.236	0.075	0.094	0.102
38	3.88	0.187	-0.694	0.236	0.075	0.094	0.101
39	3.73	0.186	-0.694	0.236	0.075	0.094	0.102
40	3.87	0.174	-0.686	0.264	0.089	0.092	0.103
41	3.89	0.173	-0.686	0.264	0.089	0.092	0.103
42	3.87	0.173	-0.686	0.264	0.089	0.092	0.103
43	3.48	0.174	-0.685	0.264	0.089	0.092	0.103
44	3.57	0.191	-0.695	0.237	0.073	0.095	0.100

Table S2 Continued

No.	LogK _{exp}	LUMO	Q _{O1}	Q _{C15}	Q _{C11}	Q _{C9}	Q _{C8}
45	3.54	0.191	-0.695	0.237	0.073	0.095	0.100
46	3.75	0.187	-0.694	0.236	0.075	0.094	0.101
47	3.88	0.177	-0.690	0.254	0.107	0.101	0.091
48	3.42	0.191	-0.695	0.237	0.073	0.095	0.100
49	3.75	0.187	-0.694	0.236	0.075	0.094	0.101
50	3.89	0.173	-0.657	0.109	0.010	0.106	0.091
51	3.58	0.114	-0.700	0.240	0.097	0.094	0.106
52	3.79	0.158	-0.691	0.278	0.088	0.092	0.103
53	2.74	0.158	-0.705	0.283	0.081	0.092	0.097
54	3.9	0.200	-0.708	0.248	0.071	0.096	0.091
55	3.91	0.187	-0.700	0.234	0.075	0.094	0.102
56	3.71	0.186	-0.699	0.234	0.075	0.094	0.102
57	3.56	0.205	-0.698	0.256	0.086	0.090	0.082
58	3.39	0.175	-0.693	0.275	0.088	0.092	0.103
59	3.62	0.174	-0.693	0.275	0.088	0.092	0.103
60	3.75	0.182	-0.701	0.261	0.107	0.098	0.091
61	2.79	0.160	-0.693	0.298	0.086	0.088	0.100
62	3.82	0.182	-0.701	0.261	0.107	0.098	0.091
63	3.86	0.182	-0.701	0.261	0.107	0.098	0.091
64	3.75	0.182	-0.701	0.261	0.107	0.098	0.091
65	3.34	0.173	0.671	0.125	0.194	0.112	0.201

Table S3 Experimental and predicted logK with residual values for the training and test set compounds by MLR and SVM models

Compound	Exp.	MLR		SVM	
		Pred.	Res.	Pred.	Res.
Train					
1	3.27	3.09	-0.18	3.25	0.02
2	3.2	3.23	0.03	3.16	0.04
3	3.1	2.88	-0.22	3.06	0.04
4	3.03	3.07	0.04	3.05	-0.02
5	3.12	3.29	0.17	3.15	-0.03
6	2.95	3.31	0.36	2.99	-0.04
7	3.3	3.23	-0.07	3.26	0.04
8	3.25	3.15	-0.1	3.08	0.17
9	2.89	3.16	0.27	3.09	-0.2
10	3.04	3.07	0.03	3.06	-0.02
11	2.83	2.81	-0.02	2.79	0.04
12	2.72	2.79	0.07	2.78	-0.06
13	3.07	2.82	-0.25	3.03	0.04
14	3.04	3.13	0.09	3.08	-0.04
15	3.03	2.85	-0.18	3.01	0.02
16	3.02	3.03	0.01	2.98	0.04
17	3	2.97	-0.03	3.04	-0.04
18	2.97	3.17	0.2	3.01	-0.04
19	3.05	3.1	0.05	3.09	-0.04
20	3.13	3.43	0.3	3.17	-0.04
21	3.04	3.08	0.04	3.08	-0.04
22	3.09	3.04	-0.05	3.05	0.04
23	2.79	3.23	0.44	3.03	-0.24
24	2.91	3.07	0.16	2.95	-0.04
25	2.92	3.08	0.16	2.96	-0.04
26	3.88	3.79	-0.09	3.77	0.11
27	3.88	3.77	-0.11	3.77	0.11
28	3.73	3.79	0.06	3.77	-0.04
29	3.87	3.61	-0.26	3.83	0.04
30	3.89	3.6	-0.29	3.81	0.08
31	3.87	3.6	-0.27	3.81	0.06
32	3.48	3.61	0.13	3.83	-0.35
33	3.54	3.85	0.31	3.79	-0.25
34	3.75	3.77	0.02	3.77	-0.02
35	3.89	3.66	-0.23	3.85	0.04
36	3.58	3.03	-0.55	3.54	0.04
37	3.79	3.5	-0.29	3.43	0.36
38	2.74	3.41	0.67	2.78	-0.04
39	3.9	3.82	-0.08	3.86	0.04
40	3.91	3.81	-0.1	3.77	0.14
41	3.71	3.79	0.08	3.75	-0.04
42	3.56	3.24	-0.32	3.6	-0.04

Table S3 Continued.

Compound	Exp.	MLR		SVM	
		Pred.	Res.	Pred.	Res.
Train					
43	3.39	3.68	0.29	3.81	-0.42
44	3.75	3.59	-0.16	3.79	-0.04
45	2.79	3.32	0.53	2.83	-0.04
46	3.82	3.59	-0.23	3.79	0.03
47	3.86	3.59	-0.27	3.79	0.07
48	3.75	3.59	-0.16	3.79	-0.04
49	3.34	3.33	-0.01	3.35	-0.01
Test					
1	3.2	3.23	0.03	3.16	0.04
2	3.18	3.23	0.05	3.16	0.02
3	3.18	3.03	-0.15	3.05	0.13
4	2.97	2.86	-0.11	2.8	0.17
5	3	2.99	-0.01	3.08	-0.08
6	3.14	3.03	-0.11	3.05	0.09
7	3.22	3.05	-0.17	3.06	0.16
8	3.23	3.23	0	2.99	0.24
9	2.82	3.39	0.57	3.21	-0.39
10	3.57	3.85	0.28	3.79	-0.22
11	3.88	3.63	-0.25	3.72	0.16
12	3.42	3.85	0.43	3.79	-0.37
13	3.75	3.77	0.02	3.77	-0.02
14	3.62	3.67	0.05	3.79	-0.17
15	3.09	2.98	-0.11	3.05	0.04

Table S4 Statistical parameters of the SVM-based methods

Statistical parameters	
R^2	0.91
q^2	0.61
R^2_{pred}	0.70
RMSEC	0.14
RMSECV	0.27
RMSEP	0.22
$(R^2 - R^2_0)/R^2$	0.001
$(R^2 - R^2_0)/R^2$	0.00
k	0.992
k'	0.998
R^2_m	0.71

RMSEC: root mean square error of calibration set

RMSECV: root mean square error of cross-validation

RMSEP: root mean square error of prediction set

Table S5 Numerical values of charge density of H...Na⁺ bond, bearing the carbon atom in the ring of 15C5, for the eleven selected complexes

$\rho(\dots \text{Na}^+)$	C₂H	C₃H	C₅H	C₆H	C₈H	C₉H	C₁₁H	C₁₂H	C₁₄H	C₁₅H
Entry No.										
6	0.01265	0.01104	0.00905	0.01108	0.01042	0.01080	0.00937	0.01063	0.00807	0.00970
12	0.01071	0.00955	0.01064	0.01005	0.00981	0.00972	0.00998	0.00948	0.01039	0.01056
18	0.00958	0.01083	0.01052	0.01016	0.00978	0.00962	0.00971	0.00956	0.01043	0.01100
24	0.01244	0.01100	0.01003	0.01105	0.01030 ^a	0.01080	0.00964	0.01076	0.00764	0.00907 ^a
30	0.00979	0.01052	0.01050	0.01006	0.00988	0.00969	0.01004	0.00953	0.01041 ^a	0.01057
36	0.00000 ^a	0.01062 ^a	0.01159 ^a	0.00862 ^a	0.01085 ^a	0.00833 ^a	0.01098 ^a	0.00000 ^a	0.01151 ^a	0.01056 ^a
42	0.00000	0.01292	0.01007	0.00817	0.01176	0.00000	0.01119	0.00870	0.01110	0.00901
48	0.00000 ^a	0.01191	0.00998	0.00791	0.01076	0.00806	0.01087	0.00795	0.01116	0.01107
54	0.00000	0.01073	0.00945	0.00820	0.01127	0.00927 ^a	0.01195	0.00896	0.01144	0.01050
60	0.00000	0.01224	0.01080	0.00000 ^a	0.01104	0.00000	0.01108	0.00000 ^a	0.01248	0.00974
65	0.00958	0.01066	0.00951	0.01071	0.00962	0.01110	0.00993	0.01113	0.00985	0.01125