|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| D:\OneDrive - Ministere de l'education nationale, de l'enseignement supérieur, de la formation professionnelle et de la recherche scientifique\qsar\données article 2\2d molecules\1.tif | D:\OneDrive - Ministere de l'education nationale, de l'enseignement supérieur, de la formation professionnelle et de la recherche scientifique\qsar\données article 2\2d molecules\2.tif | D:\OneDrive - Ministere de l'education nationale, de l'enseignement supérieur, de la formation professionnelle et de la recherche scientifique\qsar\données article 2\2d molecules\3.tif |
| C1 | **C2** | **C3** |
| D:\OneDrive - Ministere de l'education nationale, de l'enseignement supérieur, de la formation professionnelle et de la recherche scientifique\qsar\données article 2\2d molecules\4.tif | D:\OneDrive - Ministere de l'education nationale, de l'enseignement supérieur, de la formation professionnelle et de la recherche scientifique\qsar\données article 2\2d molecules\5.tif | D:\OneDrive - Ministere de l'education nationale, de l'enseignement supérieur, de la formation professionnelle et de la recherche scientifique\qsar\données article 2\2d molecules\6.tif |
| C4 | **C5** | **C6** |
| D:\OneDrive - Ministere de l'education nationale, de l'enseignement supérieur, de la formation professionnelle et de la recherche scientifique\qsar\données article 2\2d molecules\7.tif | D:\OneDrive - Ministere de l'education nationale, de l'enseignement supérieur, de la formation professionnelle et de la recherche scientifique\qsar\données article 2\2d molecules\8.tif | D:\OneDrive - Ministere de l'education nationale, de l'enseignement supérieur, de la formation professionnelle et de la recherche scientifique\qsar\données article 2\2d molecules\9.tif |
| C7 | **C8** | **C9** |
| D:\OneDrive - Ministere de l'education nationale, de l'enseignement supérieur, de la formation professionnelle et de la recherche scientifique\qsar\données article 2\2d molecules\10.tif | D:\OneDrive - Ministere de l'education nationale, de l'enseignement supérieur, de la formation professionnelle et de la recherche scientifique\qsar\données article 2\2d molecules\11.tif | D:\OneDrive - Ministere de l'education nationale, de l'enseignement supérieur, de la formation professionnelle et de la recherche scientifique\qsar\données article 2\2d molecules\12.tif |
| C10 | **C11** | **C12** |
| D:\OneDrive - Ministere de l'education nationale, de l'enseignement supérieur, de la formation professionnelle et de la recherche scientifique\qsar\données article 2\2d molecules\13.tif | D:\OneDrive - Ministere de l'education nationale, de l'enseignement supérieur, de la formation professionnelle et de la recherche scientifique\qsar\données article 2\2d molecules\14.tif | D:\OneDrive - Ministere de l'education nationale, de l'enseignement supérieur, de la formation professionnelle et de la recherche scientifique\qsar\données article 2\2d molecules\15.tif |
| C13 | **C14** | **C15** |
| D:\OneDrive - Ministere de l'education nationale, de l'enseignement supérieur, de la formation professionnelle et de la recherche scientifique\qsar\données article 2\2d molecules\16.tif | D:\OneDrive - Ministere de l'education nationale, de l'enseignement supérieur, de la formation professionnelle et de la recherche scientifique\qsar\données article 2\2d molecules\17.tif | D:\OneDrive - Ministere de l'education nationale, de l'enseignement supérieur, de la formation professionnelle et de la recherche scientifique\qsar\données article 2\2d molecules\18.tif |
| C16 | **C17** | **C18** |
| D:\OneDrive - Ministere de l'education nationale, de l'enseignement supérieur, de la formation professionnelle et de la recherche scientifique\qsar\données article 2\2d molecules\19.tif | D:\OneDrive - Ministere de l'education nationale, de l'enseignement supérieur, de la formation professionnelle et de la recherche scientifique\qsar\données article 2\2d molecules\20.tif | D:\OneDrive - Ministere de l'education nationale, de l'enseignement supérieur, de la formation professionnelle et de la recherche scientifique\qsar\données article 2\2d molecules\21.tif |
| C19 | **C20** | **C21** |
| D:\OneDrive - Ministere de l'education nationale, de l'enseignement supérieur, de la formation professionnelle et de la recherche scientifique\qsar\données article 2\2d molecules\22.tif | D:\OneDrive - Ministere de l'education nationale, de l'enseignement supérieur, de la formation professionnelle et de la recherche scientifique\qsar\données article 2\2d molecules\23.tif | D:\OneDrive - Ministere de l'education nationale, de l'enseignement supérieur, de la formation professionnelle et de la recherche scientifique\qsar\données article 2\2d molecules\24.tif |
| C22 | **C23** | **C24** |
| D:\OneDrive - Ministere de l'education nationale, de l'enseignement supérieur, de la formation professionnelle et de la recherche scientifique\qsar\données article 2\2d molecules\25.tif | D:\OneDrive - Ministere de l'education nationale, de l'enseignement supérieur, de la formation professionnelle et de la recherche scientifique\qsar\données article 2\2d molecules\26.tif | D:\OneDrive - Ministere de l'education nationale, de l'enseignement supérieur, de la formation professionnelle et de la recherche scientifique\qsar\données article 2\2d molecules\27.tif |
| C25 | **C26** | **C27** |
| D:\OneDrive - Ministere de l'education nationale, de l'enseignement supérieur, de la formation professionnelle et de la recherche scientifique\qsar\données article 2\2d molecules\28.tif | | |
| C28 | | |

**Figure s1. The optimized geometrical achieved through B3LYP/6-31G (d, p) of the studied molecules.**