




## Supplementary Information

### Pyrimidine Derivatives: QSAR Studies of Larvicidal Activity against *Aedes aegypti*

Zenaide S. Monte, <sup>a</sup> Daniela M. A. F. Navarro,<sup>b</sup> Júlio C. R. O. F. Aguiar,<sup>b</sup> Jessica S. Nascimento,<sup>b</sup> Marcus T. Scotti, <sup>c</sup> Luciana Scotti,<sup>c</sup> Renata P. C. Barros,<sup>c</sup> Aline C. S. Santos,<sup>d</sup> Valéria R. A. Pereira,<sup>d</sup> Emerson P. S. Falcão<sup>e</sup> and Sebastião J. Melo <sup>\*,a</sup>

<sup>a</sup>Programa de Pós-Graduação em Ciências Farmacêuticas e Programa de Pós-Graduação em Ciências Biológicas, Universidade Federal de Pernambuco, Avenida Professor Moraes Rego 1235, 50740-560 Recife- PE, Brazil

<sup>b</sup>Departamento de Química Fundamental, Universidade Federal de Pernambuco, 50740-560 Recife-PE, Brazil

<sup>c</sup>Programa de Pós-Graduação em Produtos Naturais e Sintéticos Bioativos, Universidade Federal da Paraíba, 58051-900 João Pessoa-PB, Brazil

<sup>d</sup>Centro de Pesquisas Aggeu Magalhães, Fundação Oswaldo Cruz, 50670-420 Recife-PE, Brazil

<sup>e</sup>Núcleo de Nutrição do Centro Acadêmico de Vitória (CAV), Universidade Federal de Pernambuco, 55608-680 Vitoria de Santo Antão-PE, Brazil

**Table S1.** Experimental values of pLC<sub>50</sub> and Dragon molecular descriptors used in equation 1

Compound	pLC <sub>50</sub> <sup>a</sup>	TDB05v	Mor04u
<b>3a</b>	3.84	0.737832526	-0.60746091
<b>3b</b>	4.23	0.425381725	-0.020591998
<b>3c</b>	4.81	0.581461845	-2.078949568
<b>3d</b>	4.90	0.385422204	-1.438820682
<b>3l</b>	3.81	0.92595778	-0.044707499
<b>3m</b>	4.06	0.616678295	0.634827348
<b>3o</b>	4.29	0.602668642	0.042514173
<b>3p</b>	4.25	0.403558278	0.676262549
<b>5a</b>	3.75	-0.265876957	0.215040228
<b>5b</b>	3.88	-0.490609662	1.415182369
<b>5c</b>	4.56	-1.861351147	0.056937664
<b>5d</b>	4.49	-2.061123529	1.149766327

<sup>a</sup>—logarithm of the lethal concentrations values (molar) for 50% of the larval population.

