Описание базы данных , где описаны показатели растворимости различных веществ в воде

SMILES - Представление молекулы в текстовом формате smiles (<https://chemicbook.com/2021/02/13/smiles-strings-explained-for-beginners-part-1.html>).

Solubility - Растворимость вещества в воде.

MolLogP - десятичный логарифм коэффициента разделения.

MolMR - Относительный молекулярный вес соединения.

HeavyAtomCount - Количество атомов не-водорода в молекуле.

NumRotatableBonds - Число поворотных связей в молекуле

NumValenceElectrons - Количество валентных электронов в соединении.

NumAromaticRings - Количество ароматических колец в молекуле.

TPSA - Топологическая площадь поверхности полярных атомов в соединении.

LabuteASA - площадь поверхности молекулы, доступная для взаимодействия с молекулами растворителя.

BertzCT - Индекс, предназначенный для количественной оценки “сложности” молекул.

MolWt - Молекулярный вес соединения.