**SIGNIFICADO DE LOS DESCRIPTORES**

**1. fr\_aryl\_methyl**

* **Significado:** Cuenta el número de grupos arilmetil en la molécula, como bencilo (C₆H₅-CH₂-).
* **Tipo de Descriptor:** 2D (basado en la estructura química y la conectividad de átomos, sin geometría tridimensional).

**2. PEOE\_VSA13**

* **Significado:** Representa el área de superficie de van der Waals para átomos con cargas parciales en un rango específico. La carga parcial se calcula usando el método PEOE (Partial Equalization of Orbital Electronegativities). Los descriptores PEOE\_VSA están divididos en varias categorías (PEOE\_VSA1, PEOE\_VSA2, etc.), cada una de las cuales representa diferentes rangos de carga parcial.
* **Tipo de Descriptor:** 2D (depende de la distribución de carga parcial calculada a partir de la conectividad, sin coordenadas espaciales).

**3. BCUT2D\_MRHI**

* **Significado:** Representa el valor BCUT basado en el momento de radio alto (MRHI), que mide la polarizabilidad y volumen molecular. Los descriptores BCUT usan matrices de conectividad modificadas y valores propios para reflejar propiedades físicas y electrónicas.
* **Tipo de Descriptor:** 2D (basado en propiedades de la estructura sin información tridimensional).

**4. VSA\_EState1**

* **Significado:** Calcula el área de superficie de van der Waals de átomos con un índice EState (estado electrotopológico) en un rango específico. Este índice describe la influencia electrónica de los átomos en función de su conectividad y puede estar relacionado con la reactividad y afinidad.
* **Tipo de Descriptor:** 2D (basado en conectividad y propiedades electrónicas sin coordenadas tridimensionales).

**5. fr\_halogen**

* **Significado:** Cuenta el número de átomos de halógeno en la molécula (como flúor, cloro, bromo e iodo). La presencia de halógenos puede influir en las propiedades físicas, toxicidad y actividad biológica de la molécula.
* **Tipo de Descriptor:** 2D (solo cuenta la presencia de ciertos átomos según su conectividad, sin información tridimensional).

**6. PEOE\_VSA4**

* **Significado:** Representa el área de superficie de van der Waals para átomos con cargas parciales en otro rango específico. Ayuda a describir la polaridad y distribución de cargas en la superficie molecular.
* **Tipo de Descriptor:** 2D (propiedades de superficie y carga parcial derivadas de la conectividad molecular).

**7. fr\_NH0**

* **Significado:** Cuenta el número de grupos NH primarios (amina primaria) en la molécula, que pueden influir en la solubilidad, formación de enlaces de hidrógeno y polaridad.
* **Tipo de Descriptor:** 2D (basado en la presencia de grupos funcionales sin geometría espacial).

**8. BCUT2D\_MWHI**

* **Significado:** Otro descriptor de BCUT, este mide el momento de peso alto (MW) para reflejar el peso molecular y distribución de átomos pesados, proporcionando información sobre la masa y polaridad.
* **Tipo de Descriptor:** 2D (propiedades de conectividad sin información espacial).

**9. PEOE\_VSA8**

* **Significado:** Este descriptor mide el área de superficie de van der Waals para átomos con cargas parciales en otro rango específico, indicando la distribución de carga superficial de la molécula.
* **Tipo de Descriptor**: 2D (propiedades de superficie y carga parcial basadas en la conectividad).