

Name	Descripción	mean	std	min	25%	50%	75%	max
acceptorcount	Conteo de átomo de aceptación de enlaces de hidrógeno en molécula, calculado en _rxn_ph	0.16	0.43	0.00	0.00	0.00	0.00	2.00
Accsitecount	Multiplicidad del aceptador de enlaces de hidrógeno en molécula, calculada en _rxn_ph	0.21	0.56	0.00	0.00	0.00	0.00	2.00
AliphaticAtomCount	Número de átomos alifáticos en la molécula	5.05	2.49	0.00	3.00	5.00	6.00	13.00
AliphaticRingCount	Número de anillos alifáticos	0.16	0.37	0.00	0.00	0.00	0.00	1.00
AromaticAtomCount	Número de átomos aromáticos en la molécula	1.53	2.65	0.00	0.00	0.00	3.00	6.00
AromaticRingCount	Número de anillos aromáticos	0.26	0.44	0.00	0.00	0.00	0.50	1.00
ASA	Área de superficie accesible de agua de la molécula, calculada en _rxn_ph	268.14	62.39	163.99	229.50	256.81	302.12	524.51
ASAH	Área de superficie accesible de agua de todos los átomos hidrófobos con carga parcial positiva, calculada en _rxn_ph	206.03	76.24	33.15	173.37	201.33	232.38	481.73
ASAP	Área de superficie accesible de agua de todos los átomos polares con carga parcial positiva, calculada en _rxn_ph	62.10	34.58	13.65	41.63	50.92	79.62	155.76
ASA-	Área de superficie accesible de agua de todos los átomos con carga parcial negativa, calculada en _rxn_ph	61.25	30.19	0.00	42.88	64.46	72.49	149.19
ASA+	Área de superficie accesible de agua de todos los átomos con carga parcial positiva, calculada en _rxn_ph	206.88	48.48	120.89	177.76	197.61	229.80	398.73
AtomCountC	Número de átomos de carbono	5.02	2.36	1.00	3.50	5.00	7.00	12.00
AtomCountN	Número de átomos de nitrógeno	1.30	0.51	1.00	1.00	1.00	2.00	3.00
AvgPol	Polarización molecular promedio (en pH indicado por _RXN_PH)	11.45	4.17	4.23	8.80	11.57	13.66	26.67
BalabanIndex	Índice de gráficos moleculares de Balaban	2.23	0.50	1.00	1.96	2.19	2.50	3.75
BondCount	Número de enlaces en la molécula	17.72	6.33	7.00	14.00	18.00	21.00	40.00
CarboaliphaticRingCount	Número de anillos alifáticos compuestos únicamente de átomos de carbono	0.05	0.21	0.00	0.00	0.00	0.00	1.00
CarboaromaticRingCount	Número de anillos aromáticos compuestos únicamente de átomos de carbono	0.23	0.43	0.00	0.00	0.00	0.00	1.00
CarboRingCount	Número de anillos compuestos únicamente de átomos de carbono	0.28	0.45	0.00	0.00	0.00	1.00	1.00
ChainAtomCount	Número de átomos que forman parte de la cadena (no parte de un anillo)	4.14	2.82	0.00	2.00	4.00	6.00	13.00
ChiralCenterCount	Número de centros estereogénicos tetraédricos	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
CyclomaticNumber	Número ciclomático de gráfico molecular	0.42	0.50	0.00	0.00	0.00	1.00	1.00
donorcount	Conteo de átomos del donante de enlace de hidrógeno en molécula, calculado en _rxn_ph	1.28	0.50	1.00	1.00	1.00	1.50	3.00
donsitecount	Multiplicidad del donante de enlaces de hidrógeno en molécula, calculada en _rxn_ph	3.28	1.18	1.00	3.00	3.00	3.50	6.00
frAmidine	Número de grupos amidinos	0.02	0.15	0.00	0.00	0.00	0.00	1.00
frAr NH	Número de aminas aromáticas	0.02	0.15	0.00	0.00	0.00	0.00	1.00
frArN	Número de n grupos funcionales adjuntos a aromáticos	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
frDihydropyridine	Número de dihidropiridinas	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
frGuanido	Número de grupos de guanidina	0.02	0.15	0.00	0.00	0.00	0.00	1.00
frImine	Número de imines	0.02	0.15	0.00	0.00	0.00	0.00	1.00
frNH0	Número de aminas terciarias	0.02	0.15	0.00	0.00	0.00	0.00	1.00
frNH1	Número de aminas secundarias	0.14	0.35	0.00	0.00	0.00	0.00	1.00
frNH2	Número de aminas primarias	0.28	0.63	0.00	0.00	0.00	0.00	3.00
frPiperdine	Número de anillos de piperidina	0.02	0.15	0.00	0.00	0.00	0.00	1.00
frPiperzine	Número de anillos de piperzina	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
frPyridine	Número de anillos de piridina	0.02	0.15	0.00	0.00	0.00	0.00	1.00
frQuatN	Número de aminas cuaternarias	1.12	0.50	0.00	1.00	1.00	1.00	2.00
Hacceptorcount	Fracción de los carbonos SP3 (valor FSP3)	0.16	0.43	0.00	0.00	0.00	0.00	2.00
Hdonorcount	Número de anillos heteroalifáticos	1.30	0.51	1.00	1.00	1.00	2.00	3.00
HeteroaliphaticRingCount	Número de anillos heteroaromáticos	0.12	0.32	0.00	0.00	0.00	0.00	1.00
HeteroaromaticRingCount	Índice Hyper Wiener de gráfico molecular	0.02	0.15	0.00	0.00	0.00	0.00	1.00
HyperWienerIndex	Punto isoeléctrico de la molécula	128.56	221.26	1.00	21.00	58.00	130.50	1365.00
LargestRingSize	Número de miembros en el anillo más grande	2.44	2.92	0.00	0.00	0.00	6.00	6.00
LengthPerpendicularToTheMaxArea	Longitud perpendicular al área de proyección máxima	5.25	0.79	3.40	5.06	5.27	5.70	7.19
LengthPerpendicularToTheMinArea	Longitud perpendicular al área de proyección mínima	8.72	2.48	4.81	6.88	8.86	9.93	19.06
MaximalProjectionArea	Masa molecular de organoamina como sal	38.18	11.60	17.05	29.04	39.14	45.17	80.65
MaximalProjectionRadius	Masa molecular de organoamina como especie neutra	4.44	1.21	2.67	3.63	4.49	4.97	9.65
maximalprojectionsize	Radio de proyección máxima	5.25	0.79	3.40	5.06	5.27	5.70	7.19
MinimalProjectionArea	Área de proyección mínima	22.70	4.79	13.66	19.16	22.95	25.60	34.16
MinimalProjectionRadius	Radio de proyección mínimo	3.21	0.40	2.33	2.90	3.25	3.40	4.32
minimalprojectionsize	Radio de proyección mínimo	8.72	2.48	4.81	6.88	8.86	9.93	19.06
MolPol	Polarización molecular (en pH indicado por _RXN_PH)	11.29	3.93	4.04	9.00	11.42	13.47	24.35
PolarSurfaceArea	Área de superficie polar topológica 2D, calculada en _rxn_ph	31.51	12.92	14.14	27.64	27.64	32.08	77.63
Refractivity	Refractividad calculada	41.92	11.17	21.21	34.41	41.21	50.10	71.89
RingAtomCount	Número de átomos que forman parte de un anillo (no parte de una cadena)	2.44	2.92	0.00	0.00	0.00	6.00	6.00
RotatableBondCount	Número de enlaces rotativos	1.44	1.94	0.00	0.00	1.00	2.00	10.00
SmallestRingSize	Número de miembros en el anillo más pequeño	2.44	2.92	0.00	0.00	0.00	6.00	6.00
VanderWaalsSurfaceArea	Van der Waals superficie de la molécula	187.06	65.46	78.34	146.29	178.29	221.16	417.97
VanderWaalsVolume	Van der Waals Volumen de la molécula	105.90	35.96	42.58	81.22	107.81	127.74	229.29