

| 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 |
| frIminine | 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 |
| WienerIndex | Índice de gráfico molecular | 55.37 | 65.34 | 1.00 | 15.50 | 32.00 | 65.50 | 364.00 |
| WienerPolarity | Polaridad de Wiener del gráfico molecular | 4.19 | 3.79 | 0.00 | 1.00 | 3.00 | 7.00 | 15.00 |